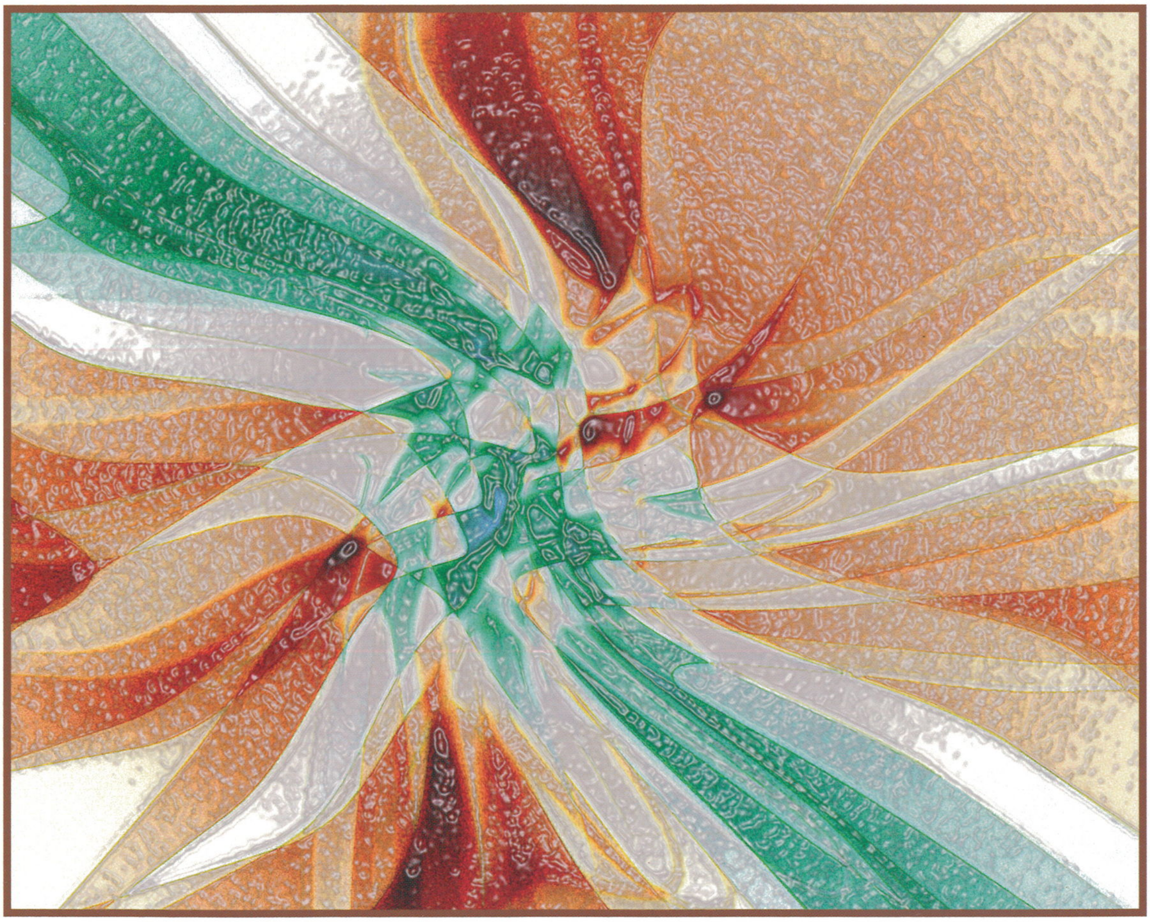
昭和38年7月2日第3種郵便物認可
2012年4月1日発行　第50巻4号　毎月1回1日発行
ISSN 0386—2240

数理科学

4
2012

特集 量子力学の数学的技法
数学の発想で量子力学へ挑む



No.586

サイエンス社

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 586 April 2012

量子力学の数学的技法

数学の発想で量子力学へ挑む

表紙：戸川　隼人

お得な定期購読をおすすめします

毎号確実に御手元へ

地域によって書店店頭に陳列されない場合があります．**郵送料小社負担**にて確実に御手元へ届く定期予約購読をおすすめします．

予約購読は1年間(本誌のみ) 11,000円，半年間(本誌のみ) 5,500円． (税込み価格)

造本コストは更に上昇気味です．小社としてもあらゆる努力をもって廉価で提供してゆきたいと思っておりますが，定価改定の止むなき事態がかんがえられます．この場合予約購読期間中のものにつきましては料金据置きとなります．なお，臨時別冊のご注文については，本誌予約購読者の方には，商品到着後のお支払いにて承ります．

お申し込みは本誌とじ込みの振替用紙を御利用下さい．

数理科学特集一覧

63年/7～2009年/5 省略

2009年/6 現象と物理概念を結ぶ方程式
/7 現代物理の世界像
/8 複素数
/9 シュレーディンガー
/10 数学と物理に広がる不変量
別冊 量子重力理論
/11 可積分系の世界
/12《原理》の探求

2010年/1 無限次元の魅力
/2 数学の可視化
/3 物理数学の効用
/4 現代数学はいかに使われているか［確率編］
別冊 現代幾何学の発展
/5 物理学事始め
/6 現代幾何と方程式
/7 物理学と行列
/8 力の統一にむけて
/9 南部陽一郎
/10 曲面の不思議
/11 連続から離散へ
/12 物理における《破れ》と調和

2011年/1 数論の探求
/2 物理現象を読み解く数学的手法
/3 方程式と現代代数学
/4 物理学と多様体
/5 初学者を悩ます数理の概念
/6 物理イメージと数式表現
/7 〈隠れた〉物理法則
/8 計算が拓く数学と物理の世界
/9 オイラー
/10 時空と熱力学
/11 線形から非線形へ
/12 物理と仮説

2012年/1 数学から物理へ，物理から数学へ
/2 古典のススメ［物理編］
/3 量子を操る

数理科学臨時別冊一覧

11年/1 超弦理論の基礎
11年/3 繰りこみ群の物理と数理
11年/4 超重力理論
11年/6 共形場理論
11年/9 演習形式で学ぶ相転移・臨界現象
11年/10 実例で学ぶ 精度保証付き数値計算
11年/11 リーマン予想の数理物理
11年/12 量子多体系の物理
12年/1 現象から方程式を創り出す
12年/3 演習形式で学ぶリー群・リー環

「数理科学」のバックナンバーは下記の書店・生協の自然科学書売場で特別販売しております

紀伊國屋書店本店(新宿)
紀伊國屋書店新宿南店
あおい書店中野本店
オリオン書房ノルテ店(立川)
くまざわ書店本店(八王子)
くまざわ書店桜ヶ丘店(多摩)
書泉グランデ(神田)
三省堂本店(神田)
リブロ池袋店
ジュンク堂書店(池袋)
ジュンク堂書店(新宿)
芳林堂(高田馬場)
MARUZEN & ジュンク堂渋谷店
八重洲ブックセンター(東京駅前)
丸善丸の内本店(東京駅前)
丸善日本橋店
丸善多摩センター店
ジュンク堂書店吉祥寺店
ブックファースト青葉台店(横浜)
有隣堂イセザキ町本店(横浜)
有隣堂西口・東口(横浜)
有隣堂厚木店(厚木)
ジュンク堂書店(盛岡)
丸善津田沼店
ジュンク堂書店(新潟)
ジュンク堂甲府岡島店
ジュンク堂新静岡店
戸田書店静岡本店
ジュンク堂大阪本店
紀伊國屋書店梅田店(大阪)
アバンティブックセンター(京都)
ジュンク堂書店(京都)
ジュンク堂京都BAL店
ジュンク堂書店三宮店
ジュンク堂三宮駅前店(神戸)
ジュンク堂書店(大分)
喜久屋書店倉敷店
MARUZEN & ジュンク堂広島店
紀伊國屋書店福岡本店
ジュンク堂福岡店
丸善博多店
ジュンク堂鹿児島店
紀伊國屋書店新潟店
ジュンク堂書店旭川店
金港堂(仙台)
金港堂パーク店(仙台)
ジュンク堂書店(仙台)
ジュンク堂書店(秋田)
ジュンク堂書店郡山店
鹿島ブックセンター(いわき)
友朋堂(つくば)

――大学生協・売店――

東京大学 本郷・駒場
東京工業大学 大岡山・長津田
東京理科大学 新宿
早稲田大学 理工学部
慶応義塾大学 矢上台
福井大学
筑波大学 大学会館書籍部 第一学群書籍部
埼玉大学
名古屋工業大学・愛知教育大学
大阪大学・神戸大学 ランス
京都大学・九州工業大学
東北大学 理薬・工学
室蘭工業大学
徳島大学 常三島
愛媛大学 城北
山形大学 小白川
島根大学
学習院大学 成文堂
北海道大学 クラーク店
熊本大学
名古屋大学
広島大学 (北1店)
九州大学 (理系)

April 2012 MATHEMATICAL SCIENCES Number 586

特集／量子力学の数学的技法

量子的数学の発展

河東 泰之

量子力学はもちろん物理学の理論であるが，当初から新しい種類の数学を必要としていることが明らかであった．行列や関数空間の話と関連していることは比較的すぐに認識されたが，当時の数学の水準を超える高度の理論を発展させなければならないことも明らかであった．例えばフォン・ノイマンの著書『量子力学の数学的基礎』はその一例として大変有名である．

数学的な立場からは，数の代わりに作用素（演算子）を考えると言うことが最も基本的な変更点だが，作用素，特に非有界作用素の理論はかなり微妙なところがあり，初等的，直感的な取扱いに頼っているとすぐに間違いに導かれる．それをきちんと扱うのが関数解析学であるが，当時は未開拓な分野であり，多くの基本的な問題が認識されていなかった．その後，フォン・ノイマン自身も含めた多くの数学者，数理物理学者の努力によって基本的な部分は確立した理論ができているが，これから解決すべき問題もまだまだ多い．私自身の研究している作用素環論もこのような流れで出てきた研究テーマの一つである．

また当初から，微分方程式を扱うことは関数解析学の大きな目的であったが，こちらにおいても目覚ましい発展をとげて現在に至っている．この方面の話題でも，量子力学と数学は様々な関係があり，現在でも双方向に影響を与え合って興味深い進展を続けている．

また，物理的立場からはさらに発展した形として，場の量子論を考える必要があるが，こちらはさらに高度の数学が必要であり，現在でも満足すべき完成形には程遠い状態にある．これについては様々な研究者が大変多くのアプローチを研究しており，我々が生きている間に研究テーマが尽きることはないであろう．

一方，幾何学も時空の構造の研究を通じて物理学との関係を深めており，特に現代では超弦理論を通じて量子力学との相互作用は強くなる一方である．1980 年代にこのような傾向は一気に深まり，代数幾何学や整数論も含め，昔はあまり物理学や量子力学と関係が深いとは思われていなかったテーマにまで，様々な影響が及んでいる．今後もこの傾向は強くなる一方であろう．

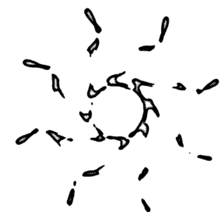
さらに最近では量子情報理論が大きく発展しており，ここにも多くの自然で重要な数学的問題がある．量子計算機，量子暗号などは実用上も大きな期待のある研究テーマなので，工学的な研究者も含め，世界中で多くの研究がなされているが，純粋に数学的な問題もまた数多い．

このように，現在では量子力学と関係の薄い数学の研究テーマを探すほうが困難な状況になっている．本特集では，量子力学と数学の関係としては，比較的古くからある話題から，現在の話題まで，多くのものを取り上げた．興味を持っていただける方を増やすことに貢献できれば幸いである．

（かわひがし・やすゆき，東京大学大学院数理科学研究科）

シュレディンガー方程式とフーリエ解析

量子力学におけるフーリエ変数の役割



中村　周

はじめに

量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式においては，フーリエ変数がとても基本的な役割を果たします．ひと言で言えば，「運動量＝フーリエ変数」です．この小文においては，シュレディンガー方程式の数学的な研究において，私が日常的に使っているフーリエ解析の役割の一端について書いてみたいと思います．

1. フーリエ変換

本題に入る前に，記号の導入をかねて，ユークリッド空間でのフーリエ変換について復習しておきましょう．空間の次元は $d \geq 1$ として，ヒルベルト空間 $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ の上で量子力学を考えることにします*1)．量子力学を考える上では，小さなパラメーター*2) $\hbar > 0$ を含むフーリエ変換を考えるのが好都合です．$f \in \mathcal{H}$ が可積分なとき，

$$\mathcal{F}f(\xi) = (2\pi\hbar)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix\cdot\xi/\hbar} f(x)dx, \quad (\xi \in \mathbb{R}^d)$$

で f のフーリエ変換 $\mathcal{F}f$ を定義します．また，しばしば $\mathcal{F}f = \hat{f}$ と書きます．よく知られているように，$\mathcal{F}$ は $L^2(\mathbb{R}^d)$ 上のユニタリー作用素を定めます*3)．波数 $(\xi/\hbar) \in \mathbb{R}^d$ の**平面波**を

$$\psi(\xi; x) = (2\pi\hbar)^{-d/2} e^{ix\cdot\xi/\hbar}, \quad (x \in \mathbb{R}^d)$$

と書くことにすれば，任意の L^2-関数 $f(x)$ は，平面波の重ね合わせとして，

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\xi)\psi(\xi; x)d\xi$$

と表現できる，というのがフーリエの反転公式です*4)．つまり，関数を一定の波数を持つ関数，つまり平面波の重ね合わせとして表現することによって関数の性質を解析しよう，というのが，フーリエ変換，フーリエ解析の基本的なアイデアでした．

2. 自由粒子の運動

量子力学の教科書を読むと，**正準量子化**の手続きとして，古典力学の運動量 $p \in \mathbb{R}^d$ を，微分作用素：

---

*1)　一般に，測度空間 $(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ 上の L^2-空間は，

$$L^2(\Omega, \mu) = \left\{ f : \Omega \mapsto \mathbb{C} \;\middle|\; \int_\Omega |f(x)|^2 d\mu(x) < \infty \right\}$$

と定義されます．$f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ に対してノルムを，$\|f\| = (\int |f(x)|^2 dx)^{1/2}$ と書くことにします．

*2)　物理学においては，プランク定数，あるいはディラック定数と呼ばれます．

*3)　$\mathcal{F}$ の逆作用素は，共役フーリエ変換

$$\mathcal{F}^* g(x) = (2\pi\hbar)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ix\cdot\xi/\hbar} g(\xi)d\xi, \ (x \in \mathbb{R}^d)$$

で与えられます．

*4)　$\hat{f}$ は可積分とは限らないので，この等式は，各点収束の意味で成り立つとは限りません．$L^2(\mathbb{R}^d)$ での収束と考えるべきですが，ここでは細かいことは省略しましょう．

$$P = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\right)_{j=1,\dots,d}$$

に置き換えよ，という説明が出てきます．その理由付けとしては，波数 $(\xi/\hbar)$ の平面波 $\psi(\xi;\cdot)$ が運動量一定 (ξ) の運動に対応しているからだ，と説明されます．しかし，粒子の運動として，なぜ ξ が運動量なのか，と言うのは，必ずしも明らかではありません．そこで，ここでは自由な粒子の運動を考えてみましょう．簡単なフーリエ解析でその解の挙動を観察すると，ξ が運動量とちょうどうまく対応していることが理解できます．

自由な粒子の運動に対応するシュレディンガー方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t,x) = H_0 f(t,x),\ f(0,x) = f_0(x),$$
$$H_0 = -\frac{1}{2m}P^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_x$$

です．ここで，$f_0 \in \mathcal{H}$ は初期状態，$m > 0$ は粒子の質量，$\triangle_x$ は x-変数に関するラプラシアン：

$$\triangle_x = \sum_{j=1}^{d}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$$

です．H_0 は自己共役作用素なので[*5]，この方程式の解は，関数解析の言葉では，

$$f(t) = e^{-itH_0/\hbar}f_0$$

と書くことができます．あるいは，x-変数に関するフーリエ変換で方程式を変換すると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}(t,\xi) = \frac{1}{2m}|\xi|^2\hat{f}(t,\xi),$$
$$\hat{f}(0,\xi) = \hat{f}_0(\xi)$$

となるので，簡単に解けて，

$$\hat{f}(t,\xi) = e^{-it|\xi|^2/2m\hbar}\hat{f}_0(\xi)$$

であることが分かります．つまり，方程式の解は，

$$f(t,x) = \int_{\mathbb{R}^d}\hat{f}_0(\xi)e^{-it|\xi|^2/2m\hbar}\psi(\xi,x)d\xi \qquad (*)$$

と書けることになります．

*5） 定義域は，2 階のソボレフ空間となります．この自己共役性の証明も，フーリエ変換を用いるのが手軽です．

以下では，簡単のため $m = 1$ とします[*6]．

定理 1 f のフーリエ変換 $\hat{f}$ は，なめらかで有界な台を持つ関数であると仮定する．$\mathrm{supp}\hat{f}_0 = K$ とする[*7]．$E \subset \mathbb{R}^d$, $K \cap E = \emptyset$, $\mathrm{dist}(K,E) > 0$ として，

$$E(t) = \left\{x \in \mathbb{R}^d : \frac{x}{t} \in E\right\}$$

と書こう[*8]．このとき，任意の N に対して $C_N > 0$ が存在して，$t \in \mathbb{R}$, $x \in E(t)$ について

$$|f(t;x)| \le C_N\hbar^N(1+|t|)^{-N}$$

が成り立つ．

証明をする前に，この定理の意味を考えてみましょう．$\hat{f}_0$ が ξ_0 の ε-近傍に台を持っていると仮定します $(\varepsilon > 0)$．つまり，考えている粒子は，だいたい ξ_0 の運動量を持っているとします．すると，フーリエ変数が運動量（＝速度）に対応しているとすれば，粒子は時間 t が大きいときに，$t\xi_0$ の近くにあることが期待されます．定理の主張していることは，x が $t\xi_0$ から $\varepsilon|t|$ 以上離れていれば，時間について急減少する，ということです[*9]．つまり，粒子はだいたい，$t\xi_0$ の大きさ $\varepsilon|t|$ の近傍にある，ということになりますから，「ξ_0 は粒子の速度である」という見方が裏付けられます．

証明 解の公式 $(*)$ に平面波の定義を代入すると，

$$f(t,x) = (2\pi)^{-d/2}\int\hat{f}_0(\xi)e^{(-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi)/\hbar}d\xi$$

と書くことができる．指数関数の部分を ξ について微分すると，

$$\frac{\partial}{\partial\xi}e^{(-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi)/\hbar} = i\frac{x-t\xi}{\hbar}e^{(-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi)/\hbar}$$

なので，$x - t\xi \ne 0$ ならば，

$$-i\hbar\frac{x-t\xi}{|x-t\xi|^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}e^{(-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi)/\hbar}$$

*6） すると，運動量と速度は同じになります．

*7） 関数 f の台を，$\mathrm{supp}f$ で表すことにします．

*8） ここで，$\mathrm{dist}(\cdot,\cdot)$ はユークリッド空間の距離です．

*9） $\hbar \to 0$ の場合を考えると，$\hbar$ についても急減少します．

$$= e^{(-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi)/\hbar}$$

であることが分かる．そこで，微分作用素 L を

$$L = -i\hbar\frac{x-t\xi}{|x-t\xi|^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}$$

と定義すると，部分積分を用いて，$x \in E(t)$ のとき

$$f(t,x) = (2\pi)^{-d/2}\int \hat{f}_0(\xi)L^N(e^{-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi})d\xi$$
$$= (2\pi)^{-d/2}\int L^{*N}(\hat{f}_0(\xi))e^{-it|\xi|^2/2+ix\cdot\xi}d\xi$$

となることが分かる．ここで，L^* は L に共役な微分作用素：

$$L^*f(\xi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\xi}\cdot\left(\frac{x-t\xi}{|x-t\xi|^2}f(\xi)\right).$$

$E(t)$ に制限して考えると，$L^{*N}\hat{f}_0(\xi)$ の大きさが $O(\hbar^N(1+|t|)^{-N})$ であることは計算で簡単に確かめられるので，結論が導かれる． □

3. 相空間と不確定性原理

さて，前節の観察から，フーリエ変数 ξ が**運動量変数**であることが，何となく納得できたとしましょう．古典力学（ニュートン方程式）を思い出すと，粒子の運動方程式は，$(x,p) \in \mathbb{R}^{2d}$ 上の 1 階微分方程式として，

$$m\dot{x}(t) = p(t), \quad \dot{p}(t) = -\nabla V(x(t))$$

と書けます．ここで，$V(x)$ はポテンシャル関数です．つまり，古典力学は**相空間**（phase space）$\mathbb{R}^{2d}$ 上の流れとして定義されているわけです．対応する量子力学の方程式は，**シュレディンガー方程式**：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t,x) = Hf(t,x),\ f(0,x) = f_0(x),$$
$$H = H_0 + V(x)$$

です．ここで，$V(x)$ はニュートン方程式と同じポテンシャル関数で，ここでは掛け算作用素として $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ 上に作用しています．つまり，シュレディンガー方程式は，ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の線形な流れとして定義されるわけです．

古典力学の空間変数 x は，そのまま波動関数 $f(t,x)$ の独立変数として入っており，$f(t,x)$ の密度 $|f(t,x)|^2$ の変化が，座標空間での粒子の運動の様子を表していることになります．一方，粒子の運動量の運動（変化）の様子は，ここまでに見てきたことから，同様に，波動関数のフーリエ変換の密度：$|\hat{f}(t,\xi)|^2$ の変化で記述されることになります．

古典力学においては，座標と運動量は，別々の変数でした．ところが，量子力学においては，座標空間で見た波動関数 $f(t,x)$ の性質が粒子の座標を記述し，波動関数のフーリエ変換 $\hat{f}(t,\xi)$ の性質が粒子の運動量を記述する，という形で，同じ波動関数（状態ベクトル）を別の形で見ているに過ぎません．したがって，例えば，初期条件において，$f_0(x)$ と $\hat{f}_0(\xi)$ を独立に決めることは（当然ながら）不可能である，ということになります．これを，量子力学の言葉で定式化したのが，有名な**ハイゼンベルクの不確定性原理**です．

不確定性原理を，フーリエ変換の言葉で述べてみましょう．関数 f が急減少関数であるとしましょう．f は正規化された状態，つまり $\|f\| = 1$ であるとします．このとき，f の分布の j-座標に関する平均と分散は，

$$\langle x_j\rangle_f = \int x_j|f(x)|^2dx \in \mathbb{R}^d,$$
$$V_j(f) = \left(\int |x_j - \langle x_j\rangle_f|^2|f(x)|^2dx\right)^{1/2}$$

で定義されます[*10]．この記号を用いると，不確定性原理は，

$$V_j(f)\cdot V_j(\hat{f}) \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (**)$$

と書くことができます[*11]．f の分散と，$\hat{f}$ の分散を同時に小さくすることはできません．これを量子力学の言葉で解釈すると，座標の分散と，運動量の分散を同時に小さくすることはできない，ということになります．

---

*10） $j \in \{1,\ldots,d\}$ です．

*11） 証明は簡単ですが，ここでは省略します．

ここで，$(**)$ は量子力学，例えばシュレディンガー方程式の時間発展とは無関係な不等式であることを注意しておきたいと思います．$(**)$ は，一般に関数とそのフーリエ変換を同時に決めることはできない，その一つの制限条件を与えているにしか過ぎません．

4. 相空間の上での解析学—超局所解析

さて，古典力学系（ニュートン方程式の解）と量子力学系（シュレディンガー方程式の解）の関係に戻りましょう．シュレディンガー方程式を，古典力学的な粒子の集まりの運動，と解釈できるとすれば，それは古典力学的な状態の空間である相空間，つまり $\mathbb{R}^{2d}$ 上の密度を与えているはずです．つまり，波動関数の密度関数は，$F(x,\xi)$ の形の関数であるはずです．しかし，上に見たように，座標空間での粒子の密度は $|f(x)|^2$ で与えられ，運動量に関する粒子の密度は $|\hat{f}(\xi)|^2$ で与えられます．これを眺めていると，(x,ξ) に関する密度には翻訳できそうにありません*12)．

座標変数とフーリエ変数を同時に扱うのが難しい，というのは，解析学，特に偏微分方程式論や調和解析において基本的な困難ですし，応用上も，量子力学のみならず信号解析でも基本的な困難であることは，20 世紀の前半から知られていました*13)．この困難を回避する方法には，いろいろな手法があるのですが，代表的なものとして，波束変換*14)と，超局所解析があります．超局所解析は，物理的な直感との結びつきが強く，また偏微分方程式論で広く用いられているので，今回はこちらについて説明しましょう*15)．

f を粒子の波動関数，$K\subset\mathbb{R}^{2d}$ を相空間の部分集合とするとき，粒子の位置，運動量の組が K に入っている確率は，形式的には，

$$p=\|\chi_K(x,P)f\|^2$$

で与えられるはずです．ここで，$\chi_K(\cdot,\cdot)$ は K の定義関数です．$\chi_K(x,P)$ を定義する一つの方法は，次のような**量子化**（quantization）を用いることです．$a=a(x,\xi)$ が与えられたとき，a をシンボルとする**擬微分作用素**（peudodifferential operator）$a(x,P)$ を

$$a(x,P)f(x)=(2\pi\hbar)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}e^{ix\cdot\xi/\hbar}a(x,\xi)\hat{f}(\xi)d\xi$$

と定義します*16)．a が x だけの関数の場合は掛け算作用素になり，a が ξ だけの関数の場合はフーリエ空間での掛け算作用素（Fourier multiplier）になることは簡単に確かめられますから，自然な定義であることが理解できます*17)．しかし，a が定義関数のような不連続な関数であると，いろいろな計算がうまくいかないことが知られており，普通は，a はなめらかな関数であることを仮定します．定義関数のような不連続な関数の場合には，必要に応じてなめらかな関数で近似して考えることになります．

擬微分作用素の演算によって，座標と運動量の関数を定義することができるようになります．座

---

*12) ちなみに，$F(x,\xi)=|f(x)|^2|\hat{f}(\xi)|^2$ と考えるのは，大きな間違いです．

*13) 信号処理では，空間変数の代わりに時間変数とそのフーリエ変数（周波数）のあいだの関係が問題になるので，time-frequency analysis と呼ばれます．

*14) Bergman 変換，Gabor 変換，FBI 変換，短時間フーリエ変換など，少しずつ異なる多くの理論があります．ウェーブレット変換も，この一種と考えられます．

*15) 波束変換と超局所解析は，互いに深い関係がありますし，どちらも有用です．偏微分方程式論の立場から見ると，解析的特異性の研究には，波束変換，具体的には FBI 変換が最も強力な道具のように見えます．また，信号処理の世界においては，ウェーブレット変換が革命的であったことはよく知られています．

*16) これを，Kohn–Nirenberg の量子化と呼びます．本当は，Weyl の量子化と呼ばれる他の定義のほうが，もう少し良い性質を持っています．Weyl の量子化は，

$$a^W(x,P)f(x)=(2\pi\hbar)^{-d}\iint e^{i(x-y)\cdot\xi/\hbar}a\left(\tfrac{x+y}{2},\xi\right)f(y)dyd\xi$$

で定義されます．特に，a が実数値の場合，$a^W(x,P)$ は自己共役作用素になりますが，$a(x,P)$ はそうとは限りません．Hermann Weyl が，量子力学への応用を念頭に導入したものでもあり，量子力学への応用には特にふさわしいものと思います．

*17) 微分作用素 $\sum a_\alpha(x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha$ も擬微分作用素として自然に表現されます．

標変数とフーリエ変数は交換することはできませんが，交換子の計算も可能になり，座標と運動量の関数である作用素の精密な解析ができるようになります．

5. 固有値の個数の評価—Weylの漸近公式とBohrの量子化規則

シュレディンガー方程式の解析に戻ると，シュレディンガー作用素 H 自身も，

$$h(x,\xi)=\frac{1}{2}|\xi|^2+V(x)$$

をシンボルとする擬微分作用素：$H=h(x,P)$ であることが分かります[*18]．すると，H の多項式も擬微分作用素になります．さらにシュレディンガー作用素の関数も，適当な仮定の下で擬微分作用素になることが分かります．つまり，$\phi(\lambda)$ を $\mathbb{R}$ 上の有界な台を持つなめらかな関数とするとき，スペクトル分解で定義される H の関数 $\phi(H)$ も擬微分作用素であることが証明できます．もっと都合のいいことに，$\phi(H)$ のシンボルの主要項は，$(\phi\circ h)(x,\xi)$ です[*19]．作用素の関数が，あたかも関数の合成であるかのように扱えることになります（もちろん，誤差はありますが）．この技術は，様々な応用があるのですが，ここでは，固有値の個数の評価への応用について紹介しましょう．

仮定 (V) V は C^∞-級の実数値関数であり，ある定数 $\beta>0$ と，任意の $\alpha\in\mathbb{Z}_+$ に対して定数 $C_\alpha>0$ が存在して，

$$\left|\left(\tfrac{\partial}{\partial x}\right)^\alpha V(x)\right|\le C_\alpha(1+|x|)^{\beta-|\alpha|}$$

が成り立つ[*20]．また，$c>0$ が存在して

$$V(x)\ge c(1+|x|)^\beta.$$

この仮定 (V) の下で，H は自己共役な作用素として一意的に定義できることはよく知られており，さらに，スペクトルは無限遠にのみ集積する有限多重度の正の固有値からなることも証明できます[*21]．$E\ge 0$ に対して，エネルギー E 以下の固有値の（多重度を込めた）個数を

$$N(E)=\#\{E\,|\,E \text{ は } H \text{ の固有値}\}$$

と書くことにしましょう．$E\to+\infty$ のとき，次のような固有値の個数の漸近公式が知られています．

$$G(E)=\big\{(x,\xi)\,\big|\,h(x,\xi)\le E\big\}\subset\mathbb{R}^{2d}$$

をエネルギー E 以下の古典力学的な粒子がいることのできる相空間の部分集合とします．

定理 2（Weylの漸近公式） 仮定 (V) の下で，

$$\lim_{E\to+\infty}\frac{N(E)}{\mathrm{vol}(G(E))}=(2\pi\hbar)^{-d}$$

が成り立つ．ここで，$\mathrm{vol}(\cdot)$ は $\mathbb{R}^{2d}$ における体積．

つまり，固有値の個数は，古典力学の粒子の入れる領域の体積（$\times(2\pi\hbar)^{-d}$）と近似的に等しい，ということがエネルギーの大きい領域で成り立つことが分かります．証明には，次のようなアイデアを用います．$\phi(H)$ のシンボルが近似的に $(\phi\circ h)(x,\xi)$ で与えられるので，$\phi(H)$ のトレース：$\mathrm{tr}(\phi(H))$ は近似的に

$$(2\pi\hbar)^{-d}\int(\phi\circ h)(x,\xi)dxd\xi$$

で与えられます[*22]．ϕ を $[0,E]$ の定義関数を近似するようななめらかな関数に選べば，$\mathrm{tr}(\phi(H))\sim$

---

*18） もちろん，ポテンシャル関数には仮定が必要です．例えば，以下の仮定 (V) を満たせば十分です．

*19） どのような意味での主要項であるかは，ここでは具体的には書きません．半古典極限を考える場合には $\hbar$ に関する展開の第1項目になりますし，解の特異性や大きなエネルギーの固有値を調べる場合は，$|\xi|$ に関する漸近展開の主要部になります．

*20） ここでは，以下のような記号を用いました．$\mathbb{Z}_+=\{0,1,2,\dots\}$，$\alpha\in\mathbb{Z}^d$ のとき，$|\alpha|=\sum\alpha_j$．また，ベクトル $\xi\in\mathbb{R}^d$ に対して $\xi^\alpha=\prod_{j=1}^d\xi_j^{\alpha_j}$ と書きます．

*21） これは，物理的には以下のように解釈されます．エネルギー $E>0$ 以下の古典力学的粒子は有界領域に留まるので，量子力学的にも固有関数は有界な領域に「閉じ込められる」．そのために，そのような束縛状態は有限個しかない．

*22） 積分核が $K(x,y)$ であるような作用素 K のトレースは，少なくとも形式的には $\mathrm{tr}(K)=\int K(x,x)dx$ で与えられます．擬微分作用素の定義を代入すれば，この公式が得られます．

$N(E)$ であり，一方，上の積分は $\mathrm{vol}(G(E))$ とほぼ等しいので，上の定理が成り立つことが分かります*23)．

また，$E \to \infty$ とする代わりに，$\hbar \to +0$ の極限（半古典極限）を考えるときも，この見方が有効です．定理 2 と全く同じアイデアで，次の定理が証明できます．

定理 3（Bohr の量子化規則） 仮定 (V) の下で，

$$\lim_{\hbar \to +0} (2\pi\hbar)^d N(E) = \mathrm{vol}(G(E))$$

が成り立つ*24)．

このように，固有値の個数に関する Weyl の公式と Bohr の量子化規則は，基本的には同じものであり，座標空間とフーリエ空間の変数を合わせた，相空間での解析によって明快に理解できることが分かります．

さいごに

この文章では，シュレディンガー方程式の研究において，フーリエ変数が座標変数と同じくらいに重要であることを説明してきました．シュレディンガー方程式の構造を理解する上では，相空間上での作用素の解析は強力な道具です．しかし，それはどのような偏微分方程式についても同じことですし，関数を扱う理論である以上必然的なことのようです．それにしても，このような手法の多くが，量子力学の研究に触発されて生まれたことも事実で，量子力学の数学は，具体的な方程式の解析と抽象的な理論が高いレベルで交叉する研究分野なのかもしれません．

もっと勉強するための参考書：フーリエ解析の教科書としては，猪狩[4]，Folland[2]が標準的で読みやすいと思います．初等的なレベルの教科書ですが，拙著[7]も，応用に重点を置いた教科書として参考になるかもしれません．本文中で触れた，信号処理とフーリエ解析との関係も簡単に説明しています．3 節で述べたようなシュレディンガー方程式の解の長時間の挙動を解析するのが（量子力学的）散乱理論です．散乱理論については，磯崎[5]，Yafaev[8]が本格的な教科書として薦められます．超局所解析に関する決定的な教科書は Hörmander の 4 巻本[3]なのですが，なかなか簡単に読める本ではありません．量子力学への応用を中心に述べた超局所解析の教科書としては，Martinez[6]，Dimassi–Sjöstrand[1]が優れていると思います．Weyl の公式（Bohr の量子化規則）については，もっと精密な結果も含めて Dimassi–Sjöstrand[1]に証明があります．

参考文献

1) M. Dimassi, J. Sjöstrand, *Spectral Asymptotics in the Semi-Classical Limit*, (London Math. Soc., 1999).
2) Gerald B. Folland: *Real Analysis* (Wiley, 1999).
3) L. Hörmander: *The Analysis of Linear Partial Differential Operators* vols.1–4, (Springer Verlag).
4) 猪狩 惺『実解析入門』（岩波書店，1996）.
5) 磯崎 洋『多体シュレーディンガー方程式』（シュプリンガー・ジャパン，2004）.
6) A. Martinez: *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis* (Springer Verlag, 2002).
7) 中村 周『フーリエ解析』（共立出版，2003）.
8) D.R. Yafaev: *Mathematical Scattering Theory: Analytic Theory* (American Math. Soc., 2010).

（なかむら・しゅう，東京大学大学院数理科学研究科）

*23） もちろん，証明としては，細かい残余項の評価が必要ですし，ϕ の選び方にも注意する必要があります．

*24） この定理の仮定は，もっと弱くても大丈夫です．例えば，$V \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$，しかも $\gamma > 0$ について $G(E+\gamma)$ が有界と仮定すれば十分です．定理 3 は，物理的には，「束縛状態は相空間で体積 $(2\pi\hbar)^d$ を占める」と説明されます．

量子力学への表現論的アプローチ

新井　朝雄

1. はじめに—短い歴史的概観

量子力学は，歴史的には，外見上相異なる 2 つの数学的形式——しかし，互いに“同等”であることが後に証明される——において登場した．その一つはハイゼンベルク (1925)[1] およびボルン–ハイゼンベルク–ヨルダン (1926)[2] による代数的な形式であり，もう一つはシュレーディンガー (1926)[3] による解析的な形式である．

前者は，思想的には，原子系に対する古典力学的描像をいったん白紙に戻し，実験的に根拠を有する量（例えば，原子からの電磁輻射の振幅や振動数の“総体”）だけを用いて理論を構築しようとするものであり，力学変数は無限行列*1) で表される．この理由から，ボルン–ハイゼンベルク–ヨルダンの量子力学は“行列力学”と呼ばれた．この理論形式で基礎となるのは，外的な力学的自由度が $d = 1, 2, \ldots$ の量子系の場合，交換関係

$$[q_j^{\mathrm{H}}, q_k^{\mathrm{H}}] = 0, \quad [p_j^{\mathrm{H}}, p_k^{\mathrm{H}}] = 0, \tag{1}$$

$$[q_j^{\mathrm{H}}, p_k^{\mathrm{H}}] = i\hbar\delta_{jk}E \quad (j, k = 1, \ldots, d) \tag{2}$$

($[A, B] := AB - BA$) を満たすエルミート無限行列*2) $q_j^{\mathrm{H}}, p_j^{\mathrm{H}}$ ($j = 1, \ldots, d$) である．ただし，i は虚数単位，$\hbar := h/2\pi$ (h はプランク定数，π は円周率)，δ_{jk} はクロネッカーのデルタ*3)，E は無限単位行列*4)，0 は無限零行列*5) である*6)．(2) で $j = k$ の場合を考えると，$q_j^{\mathrm{H}}p_j^{\mathrm{H}} - p_j^{\mathrm{H}}q_j^{\mathrm{H}} = i\hbar E$ であるので，特に，q_j^{H} と p_j^{H} は非可換である ($q_j^{\mathrm{H}}p_j^{\mathrm{H}} \neq p_j^{\mathrm{H}}q_j^{\mathrm{H}}$)．この非可換性は，ハイゼンベルク流の量子力学の本質の一つをなす．

“行列力学”における物理量は，古典力学のハミルトン形式とのある種の対応——“対応原理”——によって定められる．すなわち，古典力学系での質点の位置と運動量をそれぞれ，$x = (x_1, \ldots, x_d) \in \mathbb{R}^d$ (d 個の実数の組の全体)，$p = (p_1, \ldots, p_d) \in \mathbb{R}^d$ とすれば，量子系での“位置”と“運動量”はそれぞれ，$q^{\mathrm{H}} := (q_1^{\mathrm{H}}, \ldots, q_d^{\mathrm{H}}), p^{\mathrm{H}} := (p_1^{\mathrm{H}}, \ldots, p_d^{\mathrm{H}})$ によって与えられる．古典力学系における他の物理量は (x, p) の関数 $f(x, p)$ によって記述されるので，これに対応する，量子系での物理量は，無限行列“$f(q^{\mathrm{H}}, p^{\mathrm{H}})$”であると仮定される*7)．

例えば，質量 $m > 0$ の質点がポテンシャル $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}; x \mapsto V(x)$ の作用のもとで運動を行う古典力学系のハミルトニアン（全エネルギー）は

$$H_{\mathrm{cl}}(x, p) := \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

であるから，これに対応する量子力学的ハミルトニアンは

$$H_{\mathrm{M}} = H_{\mathrm{cl}}(q^{\mathrm{H}}, p^{\mathrm{H}})$$

*1) 無限行列（無限複素行列）とは，2 つの自然数 m, n を添え字とする，可算無限個の複素数 A_{mn} の順序づけられた組 $A = (A_{mn})$ のことである．A_{mn} を無限行列 A の (m, n) 成分という．特に，(n, n) 成分 ($n = 1, 2, \ldots$) を対角成分と呼ぶ．2 つの無限行列 A, B の和 $A + B$，スカラー倍 αA (α は複素数)，積 AB はそれぞれ，$(A + B)_{mn} := A_{mn} + B_{mn}, (\alpha A)_{mn} := \alpha A_{mn}, (AB)_{mn} := \sum_{k=1}^{\infty} A_{mk}B_{kn}$ によって定義される（「$X := Y$」は「X を Y で定義する」ことを表す記法）．ただし，積 AB に関しては $\sum_{k=1}^{\infty} A_{mk}B_{kn}$ が収束する場合のみ定義される．

*2) 無限行列 $A = (A_{mn})$ は，$\overline{A_{mn}} = A_{nm}$, $m, n = 1, 2, \ldots$ を満たすとき（複素数 z に対して，$\bar{z}$ は z の共役複素数を表す），エルミートと呼ばれる．

*3) $j = k$ ならば $\delta_{jk} := 1$；$j \neq k$ ならば $\delta_{jk} := 0$.

*4) すべての対角成分が 1 で他の成分はすべて 0 の無限行列.

*5) すべての成分が 0 の無限行列.

*6) 無限行列 $q_j^{\mathrm{H}}, p_j^{\mathrm{H}}$ ($j = 1, \ldots, d$) の存在は構成的に証明される．だが，今はこの点には立ち入らない．

*7) しかし，実は，q_j^{H} と p_j^{H} の非可換性（前段参照）により，一般の関数 f に対して無限行列“$f(q^{\mathrm{H}}, p^{\mathrm{H}})$”をどのように定義するかは，全然自明ではない問題を提起する．

$$= \sum_{j=1}^{d} \frac{(p_j^{\mathrm{H}})^2}{2m} + V(q^{\mathrm{H}}) \tag{3}$$

となる*8). "行列力学" では，物理量の離散的な観測値は，この物理量を表す無限行列の固有値*9)によって表される．特に，量子系の離散的なエネルギー準位は H_{M} の固有値として説明される．ゆえに，"行列力学" では，無限行列の固有値問題を解くことが重要な課題の一つとなる．以上の事柄から見て取れるように，ハイゼンベルク流の量子力学の数学的内容は，無限次元線形代数学の観を呈する．

他方，シュレーディンガーの理論は，ド・ブロイによる物質波の思想（1923）——光の粒子性と波動性の二面性とのアナロジーに基づいて，電子を粒子ではなく，ある種の波動とみる観点を採る——を継承するものであり，弦の振動に固有振動があるように，電子波の振動にも固有振動があり，それが原子のエネルギー準位の離散性として現れると予想するのである．このゆえに，シュレーディンガーの理論は "波動力学" と呼ばれた．具体的には，前段で取り上げた量子系の離散的なエネルギー準位 E は偏微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{4}$$

を満たす実数として与えられる．ただし，$\Delta := \sum_{j=1}^{d} \partial^2/\partial x_j^2$ はラプラシアン（ラプラス作用素）であり，ψ は $\mathbb{R}^d$ 上の複素数値関数で積分条件 $\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(x)|^2 dx < \infty$, $\int_{\mathbb{R}^d} \left|\frac{\partial^a \psi(x)}{\partial x_j^a}\right|^2 dx < \infty (a = 1, 2,\ j = 1, \ldots, d)$, $\int_{\mathbb{R}^d} |V(x)|^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty$ を満たすものとする*10)．(4) は，**定常シュレーディンガー方程式**と呼ばれる*11)．この方程式は，偏微分作用素

$$H_{\mathrm{S}} := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}$$

——$\hat{V}$ は関数 V を掛ける作用素（掛け算作用素）：$(\hat{V}\psi)(x) := V(x)\psi(x)$——を導入すると

$$H_{\mathrm{S}}\psi = E\psi$$

という形に書かれることに注意しよう．すなわち，(4) は作用素 H_{S} の固有値問題とみることができるのである*12)．作用素 H_{S} は，**シュレーディンガー作用素**と呼ばれる．これは，"行列力学" におけるハミルトニアン H_{M} の場合と同じく，古典力学系のハミルトニアン H_{cl} と

$$H_{\mathrm{S}} = H_{\mathrm{cl}}(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_d, \hat{p}_1, \ldots, \hat{p}_d) \tag{5}$$

という関係にある．ただし，$\hat{x}_j$ は x_j を掛ける作用素，$\hat{p}_j := -i\hbar D_j$（D_j は x_j に関する超関数の意味での偏微分作用素）である*13)．容易にわかるように，$\hat{x}_j, \hat{p}_j$ は，$\mathbb{R}^d$ 上の無限回微分可能な複素数値関数で台が有界なものすべてからなる関数空間 $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ を不変にし（i.e. $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ ならば $\hat{x}_j\psi, \hat{p}_j\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$），この空間上で交換関係

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0, \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0, \tag{6}$$

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad (j, k = 1, \ldots, d) \tag{7}$$

を満たす*14)．したがって，ボルン–ハイゼンベルク–ヨルダンの理論とシュレーディンガーの理論は，対応

$$(q_j^{\mathrm{H}}, p_j^{\mathrm{H}}) \longleftrightarrow (\hat{x}_j, \hat{p}_j)\ ;\ H_{\mathrm{M}} \longleftrightarrow H_{\mathrm{S}}$$

において全く同じ代数的構造をしていることがわかる．こうして，"行列力学" と "波動力学" の "同等性" が示唆される．実際，シュレーディンガーは，いま述べた構造に着目し，"行列力学" と "波動力学" の "同等性" を発見法的に示した[4]．この "同等性" は，ディラック[5]，ヨルダン[6]による "変換理論" により，さらに補強された．だが，両理論の同等性の数学的に厳密

---

*8) $k > 0$ を定数として，$V(x) = kx^2/2$ の場合（調和振動子の場合）を考えると，$V(q^{\mathrm{H}}) = \frac{k}{2}\sum_{j=1}^{d}(q_j^{\mathrm{H}})^2$ である．

*9) 無限行列 A と複素数列 $u = \{u_n\}_{n=1}^{\infty}$（$u_n$ は複素数）に対して，複素数列 Au を $(Au)_n := \sum_{k=1}^{\infty} A_{nk}u_k$ によって定義する（ただし，右辺が収束するときのみ）．複素数 λ と零でない複素数列 u があって $Au = \lambda u$ が成り立つとき，λ を A の固有値，u をその（一つの）固有ベクトルという．無限行列 A に対して，その固有値と固有ベクトルを見出す問題を A の固有値問題という．

*10) より厳密に言えば，積分はルベーグ積分の意味でとり，ψ はボレル可測関数で，x_j に関する偏導関数は超関数の意味でとらねばならない．

*11) **時間に依らないシュレーディンガー方程式**とも呼ばれる．

*12) 偏微分作用素に関する固有値および固有ベクトルの定義は無限行列の場合と同様である．いまの場合，E が H_{S} の固有値であり，ψ がその固有ベクトルである．ちなみに，量子力学に関する，シュレーディンガーの一連の論文（4 部作）[3]の題は「固有値問題としての量子化」である．**時間に依存するシュレーディンガー方程式**

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi$$

は最後（4 番目）の論文において登場する．

*13) $\hat{V} = V(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_d)$ は，V が $x_1, \ldots, x_d$ の多項式でない場合には，自明ではないが，いまは形式的・発見法的に進む．

*14) $[\hat{x}_j, \hat{x}_k]\psi = 0$, $[\hat{p}_j, \hat{p}_k]\psi = 0$, $[\hat{x}_j, \hat{p}_k]\psi = i\hbar\delta_{jk}\psi, \forall\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ という意味．

な証明と統一，そして，量子力学の普遍的本質の喝破はフォン・ノイマンの仕事（1927–31）まで待たねばならなかった．これについては節をあらためて述べよう．

2. 抽象ヒルベルト空間

フォン・ノイマン[7)]は“行列力学”と“波動力学”に共通する性質を抽象化することにより，両者を特殊な場合として含む，普遍的かつ統一的な量子力学の形式へ到達した．そこに到るための要点は2つある．その一つは，“行列力学”における力学変数（無限行列）——例えば，ハミルトニアン H_{M}——が働く空間と“波動力学”においてシュレーディンガー作用素 H_{S} が働く空間が有する共通の構造である．前者は d 重複素数列 $u=\{u_{i_1\ldots i_d}\}_{i_1,\ldots,i_d\in\mathbb{Z}_+}$（$\mathbb{Z}_+:=\{0,1,2,\ldots\}$ は非負の整数全体）でその絶対値の2乗が総和可能，i.e.

$$\sum_{i_1,\ldots,i_d=0}^{\infty}|u_{i_1\ldots i_d}|^2<\infty$$

を満たすものの全体——$\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)$ と記す——であり，後者は $\mathbb{R}^d$ 上のボレル可測な複素数値関数 $\psi:\mathbb{R}^d\to\mathbb{C}$（複素数全体）でその絶対値の2乗が可積分，i.e.

$$\int_{\mathbb{R}^d}|\psi(x)|^2dx<\infty$$

を満たすものの全体——$L^2(\mathbb{R}^d)$ と記す——である．$\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)$ は，数列の和とスカラー倍に関して，また，$L^2(\mathbb{R}^d)$ は関数の和とスカラー倍に関して，複素ベクトル空間（線型空間）をなす．すなわち，$X=\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)$ または $L^2(\mathbb{R}^d)$ とすれば，任意の $f,g\in X$ と $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ に対して，$\alpha f+\beta g\in X$ であり[*15)]，零元 0（$f+0=f,\forall f\in X$ を満たす元 0）が存在して——$X=\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)$ の場合は零数列（すべての項が0の数列），$X=L^2(\mathbb{R}^d)$ の場合は，零関数（値域が $\{0\}$ の関数）——和に関する交換法則，結合法則，スカラー倍に関する分配法則，結合法則が成り立つ．さらに，これらの空間には，通常の2次形式の無限版ともいうべき2変数写像 $Q_X:X\times X\to\mathbb{C}$ が存在する[*16)]：

$$Q_{\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)}(u,v):=\sum_{i_1,\ldots,i_d=0}^{\infty}\overline{u_{i_1\ldots i_d}}v_{i_1\ldots i_d},\quad u,v\in\ell^2(\mathbb{Z}_+^d),$$

$$Q_{L^2(\mathbb{R}^d)}(\psi,\phi):=\int_{\mathbb{R}^d}\overline{\psi(x)}\phi(x)dx,\quad \psi,\phi\in L^2(\mathbb{R}^d).$$

$\langle f,g\rangle_X:=Q_X(f,g)$ とすれば，これは次の (X.1)～(X.4) の性質を有する：

(X.1) $\langle f,f\rangle_X\geq 0,\forall f\in X$.
(X.2) $\langle f,f\rangle_X=0\Longleftrightarrow f=0$[*17)].
(X.3) すべての $f,g_1,g_2\in X,\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ に対して $\langle f,\alpha g_1+\beta g_2\rangle_X=\alpha\langle f,g_1\rangle_X+\beta\langle f,g_2\rangle_X$.
(X.4) $\overline{\langle f,g\rangle_X}=\langle g,f\rangle_X,\ f,g\in X$.

空間 X および性質 (X.1)～(X.4) を抽象的な次元へともたらすことにより，ある一つの普遍的な空間概念へと到達することができる[7)]：

複素ベクトル空間 $\mathfrak{H}$ の任意の2つの元 $\Psi,\Phi\in\mathfrak{H}$ に対して，複素数 $\langle\Psi,\Phi\rangle$ が唯一つ定まり，以下の (H.1)～(H.4) が成り立つとき，$\mathfrak{H}$ を**抽象ヒルベルト空間**または単に**ヒルベルト空間**という[*18)]：

(H.1)（正定値性） $\langle\Psi,\Psi\rangle\geq 0,\ \forall\Psi\in\mathfrak{H}$;$\langle\Psi,\Psi\rangle=0\Longleftrightarrow\Psi=0$.

(H.2)（線形性） すべての $\Psi,\Phi,\Theta\in\mathfrak{H}$ と $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ に対して

$$\langle\Psi,\alpha\Phi+\beta\Theta\rangle=\alpha\langle\Psi,\Phi\rangle+\beta\langle\Psi,\Theta\rangle.$$

(H.3)（エルミート性または対称性） すべての $\Psi,\Phi\in\mathfrak{H}$ に対して，$\overline{\langle\Psi,\Phi\rangle}=\langle\Phi,\Psi\rangle$.

(H.4)（完備性） $\|\Psi\|:=\sqrt{\langle\Psi,\Psi\rangle},\Psi\in\mathfrak{H}$ を Ψ のノルムと呼ぶ．$\mathfrak{H}$ のベクトル列 $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ が $\|\Psi_n-\Psi_m\|\to 0\,(n,m\to\infty)\ldots(*)$ を満たすならば，あるベクトル $\Psi\in\mathfrak{H}$ が存在して，$\lim_{n\to\infty}\|\Psi_n-\Psi\|=0\ldots(**)$ が成り立つ[*19)].

ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ の次元はベクトル空間としてのそ

---

*15) これは，初等的不等式 $|a+b|^2\leq 2|a|^2+2|b|^2,\ a,b\in\mathbb{C}$ を応用すれば，ただちに示される．

*16) 次の2つの式の右辺の存在は，初等的な不等式 $|ab|\leq(|a|^2+|b|^2)/2,a,b\in\mathbb{R}$ から従う．

*17) $X=L^2(\mathbb{R}^d)$ の場合は，「$f=\psi=0$」は「ルベーグ測度 dx に関してほとんどいたるところの x に対して $\psi(x)=0$ が成り立つこと」と定義する．このように定義することにより，$X=L^2(\mathbb{R}^d)$ の場合に対して，今述べた性質が満たされる．

*18) より正確に言えば，抽象複素ヒルベルト空間．ベクトル空間の係数体が実数体 $\mathbb{R}$ の場合には，対応する抽象ヒルベルト空間は，抽象実ヒルベルト空間と呼ばれる．

*19) フォン・ノイマンの論文[7)]では，以上の公理に加えて，$\mathfrak{H}$ の無限次元性および可分性（可算無限個の元からなる部分集

れとして定義する．(H.1)〜(H.3) の性質を満たす写像 $\langle\cdot,\cdot\rangle:\mathfrak{H}\times\mathfrak{H}\to\mathbb{C};\mathfrak{H}\times\mathfrak{H}\ni(\Psi,\Phi)\mapsto\langle\Psi,\Phi\rangle\in\mathbb{C}$ を $\mathfrak{H}$ の**内積**という．これは，上述の写像 $Q_X=\langle\cdot,\cdot\rangle_X$ の抽象化である．(H.4) における条件 $(*)$ を満たすベクトル列 $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ は $\mathfrak{H}$ の**基本列**または**コーシー列**と呼ばれる．(H.4) は $\mathfrak{H}$ の任意の基本列 $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ が必ずあるベクトル $\Psi\in\mathfrak{H}$ に収束すること——$(**)$ が成立すること——を意味する．完備性の条件は，抽象ヒルベルト空間上の解析学を展開する上で本質的である[*20)]．

空間 $\ell^2(\mathbb{Z}_+^d)$ と $L^2(\mathbb{R}^d)$ は無限次元ヒルベルト空間の例である．こうして，“行列力学” と “波動力学” の基礎にある空間が抽象ヒルベルト空間として統一される．さらに，歴史的には，M. ボルン[8)]による確率解釈——例えば，“波動力学” における $\psi\in L^2(\mathbb{R}^d)$ に対して，$|\psi(x)|^2/\int_{\mathbb{R}^d}|\psi(x)|^2dx$ は量子的粒子の “位置” の確率密度を与えるとする解釈——を経て，次の公理が定立される：

[量子系の状態に関する公理]　各量子系 S に対して，ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ が同伴し，系の状態は $\mathfrak{H}$ の零でないベクトルによって表される．ただし，定数倍だけ異なるベクトルは同じ状態を表す．この意味での $\mathfrak{H}$ を系 S の**状態のヒルベルト空間**という．

注意 1　状態のヒルベルト空間の選び方には，ユニタリ変換[*21)]の任意性がある．すなわち，$\mathfrak{H}$ が量子系 S の状態のヒルベルト空間ならば，これとユニタリ変換で結ばれるヒルベルト空間も S の状態のヒルベルト空間である．状態のヒルベルト空間の外見上の違いは，量子系に対する観測の枠組みの違い——量子的粒子は，観測の仕方に応じて異なる “姿” をとって現れる——に対応する[*22)]．

合 $\{\Psi_1,\Psi_2,\ldots\}\subset\mathfrak{H}$ が存在して，任意の $\Psi\in\mathfrak{H}$ と任意の $\varepsilon>0$ に対して，$\|\Psi-\Psi_n\|<\varepsilon$ となる Ψ_n が存在するという性質）も公理として要請されている．だが，これはより一般的な観点から言えば，第一次的公理系に含める必要はない．

*20)　古典解析学において，実数体 $\mathbb{R}$ の完備性が不可欠であることを想起されたい．

*21)　ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ から（一般には別の）ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}'$ への写像 $U:\mathfrak{H}\to\mathfrak{H}'$ が (i)（線形性）$U(\alpha\Psi+\beta\Psi)=\alpha U(\Psi)+\beta U(\Phi),\Psi,\Phi\in\mathfrak{H},\alpha,\beta\in\mathbb{C}$；(ii)（全射性）$\mathfrak{H}'=\{U(\Psi)|\Psi\in\mathfrak{H}\}$；(iii)（内積保存性）$\langle U(\Psi),U(\Phi)\rangle=\langle\Psi,\Phi\rangle,\Psi,\Phi\in\mathfrak{H}$ を満たすとき，U をユニタリ変換またはユニタリ作用素という．

*22)　例えば，上述の $L^2(\mathbb{R}^d)$ は量子的粒子の粒子的描像に基づいて，その位置を観測するという枠組みに対応する状態のヒルベルト空間であり，$L^2(\mathbb{R}^d)$ のフーリエ変換 $\mathcal{F}_d(L^2(\mathbb{R}^d))=\{\mathcal{F}_d\psi|\psi\in L^2(\mathbb{R}^d)\}$——$L^2$ の意味で $(\mathcal{F}_d\psi)(p):=(2\pi\hbar)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}e^{-ipx/\hbar}\psi(x)dx,p\in\mathbb{R}^d,\psi\in L^2(\mathbb{R}^d)$（$\mathcal{F}_d$ はユニタリ変換）——は，運動量 p を観測する枠組みに対応する状態のヒルベルト空間である．

3. 正準交換関係の表現

前節のはじめに言及した要点のもう一つは，基本的な力学変数——“行列力学” の場合は $q_j^{\mathrm{H}},p_j^{\mathrm{H}}$，“波動力学” の場合は $\hat{x}_j,\hat{p}_j$ $(j=1,\ldots,d)$——が満たす代数的構造が同じであるという事実である（(1), (2) と (6), (7) を参照）．この側面は次のように抽象化される：ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の線形作用素[*23)]の組 $\{Q_j,P_j\}_{j=1}^d$ と $\mathfrak{H}$ の稠密な部分空間[*24)] $\mathfrak{D}\subset\cap_{j=1}^d[D(Q_j)\cap D(P_j)]$ があって，各 Q_j,P_j は $\mathfrak{D}$ を不変にし（i.e. $\Psi\in\mathfrak{D}$ ならば $Q_j\Psi,P_j\Psi\in\mathfrak{D}$），$\mathfrak{D}$ 上で交換関係

$$[Q_j,Q_k]=0,\quad[P_j,P_k]=0,\tag{8}$$

$$[Q_j,P_k]=i\hbar\delta_{jk}I\tag{9}$$

（I は $\mathfrak{H}$ 上の恒等作用素[*25)]）が成り立つ[*26)]．抽象的代数的関係式としての(8), (9) を**自由度 d の正準交換関係**（canonical commutation relations; CCR と略）といい，これらの関係式がヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の線形作用素 Q_j,P_j $(j=1,\ldots,d)$ を用いて，上述のような仕方で実現されるとき，三つ組 $\pi_{\mathrm{CCR}}:=(\mathfrak{H},\mathfrak{D},\{Q_j,P_j\}_{j=1}^d)$ を**自由度 d の CCR の表現**と呼ぶ．

すべての Q_j,P_j $(j=1,\ldots,d)$ が対称[*27)]であると

*23)　ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ の部分空間 $\mathfrak{D}$ から $\mathfrak{H}$ への写像 $T:\mathfrak{D}\to\mathfrak{H};\mathfrak{D}\ni\Psi\mapsto T(\Psi)\in\mathfrak{H}$ が線形性：$T(\alpha\Psi+\beta\Phi)=\alpha T(\Psi)+\beta T(\Phi),\Psi,\Phi\in\mathfrak{D},\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ を満たすとき，T を $\mathfrak{H}$ 上の線形作用素という．この場合，$\mathfrak{D}$ を T の定義域といい，$\mathfrak{D}=D(T)$ と記す．また，$T(\Psi)=T\Psi$ のようにも書く．2 つの線形作用素 T,S について $T=S$（作用素の等式）は「$D(T)=D(S)$ かつ $T\Psi=S\Psi,\forall\Psi\in D(T)=D(S)$」によって定義される．定数 $C>0$ が存在して，$\|T\Psi\|\le C\|\Psi\|,\forall\Psi\in D(T)$ が成り立つならば，T は有界であるという．

*24)　任意の $\Psi\in\mathfrak{H}$ に対して，ベクトル列 $\Psi_n\in\mathfrak{D}$ が存在して，$\lim_{n\to\infty}\|\Psi_n-\Psi\|=0$ が成り立つとき，$\mathfrak{D}$ は $\mathfrak{H}$ で稠密であるという．

*25)　$I(\Psi)=\Psi,\forall\Psi\in\mathfrak{H}$.

*26)　“行列力学” の場合の $\mathfrak{D}$ としては，例えば，有限項を除くすべての項が 0 であるような複素数列の全体 $\ell_0(\mathbb{Z}_+^d):=\{u=\{u_{i_1\cdots i_d}\}_{i_1,\ldots,i_d\in\mathbb{Z}_+}$ | 正の実数 R があって $\sqrt{\sum_{k=1}^d i_k^2}>R$ ならば $u_{i_1\cdots i_d}=0\}$ をとることができる．他方，“波動力学” の場合は，$\mathfrak{D}$ として，$C_0^{\infty}(\mathbb{R}^d)$ がとれる．

*27)　ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の線形作用素 T について，$D(T)$ が稠密であり，任意の $\Psi,\Phi\in D(T)$ に対して，$\langle\Psi,T\Phi\rangle=\langle T\Psi,\Phi\rangle$ が成り立つとき，T は対称であるという．

き，π_{CCR} を**対称表現**という．また，それらが自己共役[*28)]ならば，π_{CCR} を**自己共役表現**という．

“行列力学” における CCR の表現 $(\ell^2(\mathbb{Z}_+^d), \ell_0(\mathbb{Z}_+^d), \{q_j^{\mathrm{H}}, p_j^{\mathrm{H}}\}_{j=1}^d)$ と “波動力学” における CCR の表現 $(L^2(\mathbb{R}^d), C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \{\hat{x}_j, \hat{p}_j\}_{j=1}^d)$ はいずれも自己共役表現であり，前者は**ボルン–ハイゼンベルク–ヨルダン表現**，後者は**シュレーディンガー表現**と呼ばれる[9)]．

こうして，外的な自由度が d の量子系の状態のヒルベルト空間は，自由度 d の CCR の表現が実現されているようなヒルベルト空間であり，当の量子系における物理量は，CCR の表現を実現している作用素から構成される，という構造が浮かびあがる．実際，量子力学の多くのモデルを精査することにより，この構造は，有限自由度の量子力学の普遍的な理念的本質を表すものであることがわかる．

注意 2 $(\mathfrak{H}, \mathfrak{D}, \{Q_j, P_j\}_{j=1}^d)$ を自由度 d の CCR の表現とする．このとき，$\mathfrak{H}$ は有限次元ではない（仮に $\mathfrak{H}$ が N 次元であるとすれば，$\mathfrak{D}$ の稠密により，$\mathfrak{D} = \mathfrak{H}$ である．そこで，$[Q_j, P_j] = i\hbar E$ の両辺のトレースをとれば，$0 = i\hbar N$ となるので矛盾）．さらに，各 $j = 1, \ldots, d$ に対して，Q_j, P_j の少なくとも一つは非有界であることが示される[10, 11)]．

一般に，ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の対称作用素 T と単位ベクトル（ノルムが 1 のベクトル）$\Psi \in D(T)$ に対して

$$(\varDelta T)_\Psi := \|(T - \langle \Psi, T\Psi \rangle)\Psi\|$$

を状態 Ψ における T の**不確定さ**という．これは，量子力学の文脈では，状態 Ψ において，T に対応する物理量を測定したときの測定値——これは，一般には確率的に分布する——の平均のまわりの拡がり具合を表す量である（$(\varDelta T)_\Psi$ が小さいほど，その拡がりは小さい）．$(\mathfrak{H}, \mathfrak{D}, \{Q_j, P_j\}_{j=1}^d)$ を CCR の任意の対称表現とするとき，(9) は，Q_j と P_j の不確定さに関して

$$(\varDelta Q_j)_\Psi (\varDelta P_j)_\Psi \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Psi \in \mathfrak{D}, \quad \|\Psi\| = 1$$

という制限を導くことが証明される[12)]．これを**ハイゼンベルクの不確定性関係**という．

*28) ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の線形作用素 T の定義域 $D(T)$ が稠密ならば，その共役作用素 T^* が次のように定義される：$D(T^*) := \{\Phi \in \mathfrak{H} |$ ある $\chi \in \mathfrak{H}$ が存在して $\langle \Phi, T\Psi \rangle = \langle \chi, \Psi \rangle, \forall \Psi \in D(T)\}$；$T^*\Phi := \chi$．$T$ が作用素の等式 $T = T^*$ を満たすとき，T を自己共役作用素と呼ぶ．自己共役作用素は対称作用素であるが，この逆は成立しない．

4. CCR の表現の同値性と非同値性

量子力学の普遍的本質を前節で述べたような形で捉える場合，次に問題となるのは，“行列力学” と “波動力学” の場合のように，外見上異なる CCR の表現によって記述される量子系の関係である．これは，数学的には，CCR の表現の “同値性” あるいは “非同値性” の問題に帰着される．そこで，CCR の表現の同値性の概念を定義しよう：2 つの CCR の表現 $(\mathfrak{H}, \mathfrak{D}, \{Q_j, P_j\}_{j=1}^d)$, $(\mathfrak{H}', \mathfrak{D}', \{Q'_j, P'_j\}_{j=1}^d)$ について，ユニタリ変換 $U : \mathfrak{H} \to \mathfrak{H}'$ が存在して，作用素の等式 $UQ_jU^{-1} = Q'_j, UP_jU^{-1} = P'_j \, (j = 1, \ldots, d)$ が成り立つとき，これら 2 つの表現は**ユニタリ同値**であるという[*29)]．

量子力学において，実際に観測される量はユニタリ変換の下で不変な量であるから，同値な CCR の表現によって記述される量子系の物理は同じである．

“行列力学” を与える CCR の表現 $(\ell^2(\mathbb{Z}_+^d), \ell_0(\mathbb{Z}_+^d), \{q_j^{\mathrm{H}}, p_j^{\mathrm{H}}\}_{j=1}^d)$ と “波動力学” を与える CCR の表現 $(L^2(\mathbb{R}^d), C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \{\hat{x}_j, \hat{p}_j\}_{j=1}^d)$ はユニタリ同値であることが証明される[13)]．こうして，ボルン–ハイゼンベルク–ヨルダンによる量子論とシュレーディンガーによる量子論との完全な同等性が示される．実は，この同等性はもっと一般的な事実の特殊な場合であることがわかる．この点について次にやや詳しく述べよう．

まず，CCR の表現の一つのクラスを導入する：ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の $2d$ 個の自己共役作用素の組 $\{Q_j, P_j\}_{j=1}^d$ が**ヴァイル関係式**

$$e^{itQ_j} e^{isQ_k} = e^{isQ_k} e^{itQ_j},$$
$$e^{itP_j} e^{isP_k} = e^{isP_k} e^{itP_j},$$
$$e^{itQ_j} e^{isP_k} = e^{-ist\delta_{jk}} e^{isP_k} e^{itQ_j}$$
$$(t, s \in \mathbb{R}, j, k = 1, \ldots, d)$$

を満たすとき[*30)]，$(\mathfrak{H}, \{Q_j, P_j\}_{j=1}^d)$ を**自由度 d の CCR のヴァイル表現**という[*31)]．すべての $t \in \mathbb{R}$ と $j = 1, \ldots, d$ に対して，e^{itQ_j}, e^{itP_j} の作用のもとで不

*29) $\mathfrak{D}, \mathfrak{D}'$ の選び方は一意的ではないので，これらについては，U に関する条件は要請しない．

*30) 自己共役作用素 T と実数 t に対して，e^{itT} は T のスペクトル測度を用いて定義されるユニタリ作用素である[14)]．$\cap_{l=1}^\infty D(T^l)$ に含まれる，ある稠密な部分空間の任意のベクトル Ψ に対して $e^{itT}\Psi = \sum_{l=0}^\infty \frac{(it)^l}{l!} T^l \Psi$ が成立する．

*31) これは，実際に，自由度 d の CCR の自己共役表現であることが示される．だが，この逆は成立しない．

変な部分空間が $\{0\}$ または $\mathfrak{H}$ 全体であるとき，ヴァイル表現 $(\mathfrak{H},\{Q_j,P_j\}_{j=1}^d)$ は**既約**であるという．

ボルン–ハイゼンベルク–ヨルダン表現やシュレーディンガー表現は，いずれも既約なヴァイル表現である[15]．次の定理が成り立つ：

定理 1（フォン・ノイマンの一意性定理[16]） $(\mathfrak{H},\{Q_j,P_j\}_{j=1}^d)$ を CCR のヴァイル表現とし，$\mathfrak{H}$ は可分*32) であるとする．このとき，$\mathfrak{H}$ の閉部分空間 $\mathfrak{H}_r$ ($r=1,\ldots,N$；$N<\infty$ または N は可算無限) が存在して，次の (1)〜(4) が成立する：

(1) $\mathfrak{H}=\oplus_{r=1}^N\mathfrak{H}_r$ ($\mathfrak{H}_r$ のヒルベルト空間直和*33))．

(2) $j=1,\ldots,d$ と任意の $t\in\mathbb{R}$ に対して，e^{itQ_j},e^{itP_j} は各 $\mathfrak{H}_r$ を不変にする．
Q_j,P_j の $D(Q_j)\cap\mathfrak{H}_r$ へ制限をそれぞれ，$Q_j^{(r)},P_j^{(r)}$ とする．

(3) 各 r に対して，ユニタリ変換 $U_r:\mathfrak{H}_r\to L^2(\mathbb{R}^d)$ が存在して，$U_rQ_j^{(r)}U_r^{-1}=\hat{x}_j$，$U_rP_j^{(r)}U_r^{-1}=\hat{p}_j$ $(j=1,\ldots,d)$ が成り立つ．

(4) $(\mathfrak{H},\{Q_j,P_j\}_{j=1}^d)$ が既約ならば，それはシュレーディンガー表現 $(L^2(\mathbb{R}^d),\{\hat{x}_j,\hat{p}_j\}_{j=1}^d)$ にユニタリ同値である．

定理 1 の (1)〜(3) の事実を指して，「可分なヒルベルト空間上の CCR のヴァイル表現は，シュレーディンガー表現の直和に同値である」という．しかし，ここで注意しなければならないことは，この意味での同値性は，あくまでも可分なヒルベルト空間上のヴァイル表現に限るということである．実際，CCR の自己共役表現でシュレーディンガー表現の直和に同値でないものが存在する．しかも，そのような表現の中にはアハラノフ–ボーム効果のような特徴的な物理現象と結びついているものがある[17]．

5. 弱ヴァイル表現と強時間作用素

CCR のヴァイル表現よりも弱い表現のクラスが存在する．簡単のため，1 自由度の場合についてのみ述べる．ヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ 上の閉対称作用素 T （$(T^*)^*=T$ を満たす対称作用素）と自己共役作用素 H が次の 2 つの性質 (i), (ii) を満たすとき，$(\mathfrak{H},\{T,H\})$ を正準交換関係の**弱ヴァイル表現**という*34)：

(i) 任意の $t\in\mathbb{R}$ に対して，$e^{-itH/\hbar}D(T)\subset D(T)$.

(ii) 任意の $\Psi\in D(T)$ に対して，$Te^{-itH/\hbar}\Psi=e^{-itH/\hbar}(T+t)\Psi$.

(ii) における式の t に関する強微分を考察することにより，T,H が $D(TH)\cap D(HT)$ 上で自由度 1 の CCR を満たすこと，すなわち，任意の $\Psi\in D(TH)\cap D(HT)$ に対して，$[T,H]\Psi=i\hbar\Psi$ が成り立つことが示される[18]．したがって，不確定性関係

$$(\Delta H)_\Psi(\Delta T)_\Psi\geq\frac{\hbar}{2}$$
$$(\Psi\in D(TH)\cap D(HT),\|\Psi\|=1)\qquad(10)$$

が成立する．

T が自己共役ならば，弱ヴァイル表現 $(\mathfrak{H},\{T,H\})$ は自由度 1 のヴァイル表現になる．したがって，弱ヴァイル表現 $(\mathfrak{H},\{T,H\})$ がヴァイル表現でないためには，T が自己共役でないことが必要十分である．ゆえに，この場合の T は，量子力学の文脈では，通常の意味での物理量ではあり得ない*35)．

弱ヴァイル表現 $(\mathfrak{H},\{T,H\})$ は，量子力学の文脈では，H がハミルトニアンである場合に，特に重要性を有する．この場合，T を**強時間作用素**と呼ぶ*36)．H がハミルトニアンの場合，(10) は**時間とエネルギーの不確定性関係**の一形態を与えると解釈され得る．さらに，ハミルトニアン H が強時間作用素 T をもつならば，H は純粋に絶対連続であり（したがって，固有値をもたない），時刻 0 での状態が $\Psi\in D(T^n)$ （$\|\Psi\|=1$, n は自然数）であるという条件の下で，時刻 $t\in\mathbb{R}\setminus\{0\}$ での観測において状態 $\Phi\in D(T^n)$ （$\|\Phi\|=1$）が見出される確率 $|\langle\Phi,e^{-itH/\hbar}\Psi\rangle|^2$ は次のように評価される[19]：

---

*32) $\mathfrak{H}$ の稠密な部分集合で高々可算個の元からなるものが存在するとき，$\mathfrak{H}$ は可分であるという．

*33) $\oplus_{r=1}^N\mathfrak{H}_r:=\{\Psi=\{\Psi_r\}_{r=1}^N|\Psi_r\in\mathfrak{H}_r,r=1,\ldots,N,\sum_{r=1}^N\|\Psi_r\|^2<\infty\}$ （$N<\infty$ のときは収束性の条件は要らない）．内積は $\langle\Psi,\Phi\rangle:=\sum_{r=1}^N\langle\Psi_r,\Phi_r\rangle$ （$\Psi,\Phi\in\oplus_{r=1}^N\mathfrak{H}_r$）によって定義される．

*34) (i), (ii) の条件は，実は，作用素の等式 $e^{itH/\hbar}Te^{-itH/\hbar}=T+tI,\forall t\in\mathbb{R}$，と同値である．

*35) 量子力学の通常の公理系によれば，物理量は，状態のヒルベルト空間上の自己共役作用素によって表される．

*36) 単に $[T,H]=i\hbar I$ を満たす T は**時間作用素**と呼ばれる．上に言及したように，T が強時間作用素ならば，それは時間作用素であるが，この逆は成立しない．なお，量子力学におけるパラメーターとしての時間 t は，物理量ではないので，T の固有値またはスペクトルが時間を表すと解釈する必然性はない．実際，T が自己共役でなければ，T のスペクトルは虚数も含むので，別の解釈が必要になる．

$$\left|\left\langle \Phi, e^{-itH/\hbar}\Psi \right\rangle\right|^2 \le \frac{C_n(\Phi,\Psi)}{|t|^{2n}}.$$

ただし，$C_n(\Phi,\Psi)$ は T,Ψ,Φ だけから定まる定数である[*37)]．

弱ヴァイル表現については，以上の他にもいろいろと興味深い性質が見出される．例えば，強時間作用素のスペクトルの構造[20)]，弱ヴァイル表現からヴァイル表現が構成される構造の存在[21)]，あるクラスの弱ヴァイル表現の一意性[22)]，代数的量子力学や量子場の理論への応用[23)]等．

注意 3 上の場合とは対照的に，ハミルトニアン H のスペクトルが純粋に離散的な場合にも時間作用素は存在し得る（もちろん，この場合の時間作用素は強時間作用素ではない）[24, 25)]．

6. おわりに

本稿では，CCR を量子力学の根源的原理の一つとして措定し，その表現として諸々の量子現象を統一的に捉えていく観点の概略を叙述した．紙幅の都合上，有限自由度の CCR だけに話を限定したが，無限自由度の CCR とその表現についても並行的な考察が可能である．無限自由度の CCR の表現は，物質界の根源を支える量子場のモデルを構成する上で基本となる要素の一範疇をなす[26)]．無限自由度の CCR の表現が有限自由度のそれと異なる点の一つは，前者の場合，もはや，フォン・ノイマンの一意性定理（定理 1）に相当する定理の存在を期待できないということである．実際，無限自由度の CCR の場合，ヴァイル型表現に限っても，互いにユニタリ同値でない表現が無数に存在する．だが，それだけいっそう，無限自由度の CCR の表現に基づく，量子現象の枠組みの多様性が示唆されるわけであり，表現論的な観点からのアプローチによる研究の興味と重要性も増す．

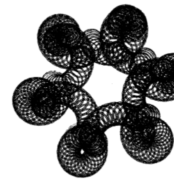
参考文献

1) W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, **33** (1925), 879.
2) M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: *Zeitschrift für Physik*, **35** (1926), 557.
3) E. Schrödinger: *Annalen der Physik*, **79** (1926), 361, 489; **80** (1926), 437; **81** (1926), 109. これらの論文の英訳が，E. Schrödinger, *Collected Papers on Wave Mechanics*, Chelsea Publishing Company, 1978 に収められている．
4) E. Schrödinger: *Annalen der Physik*, **79** (1926), 753.
5) P.A.M. Dirac: *Proc. Roy. Soc.*, **113** (1926/27), 621.
6) P. Jordan: *Zeitschrift für Physik*, **40** (1927), 809.
7) J. von Neumann, *Gött. Nach.*, **1** (1927), 1. 同著者による *Die mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*（Springer, 1932；邦訳，『量子力学の数学的基礎』，みすず書房，1957）の 1 章の 4 節も参照．
8) M. Born, *Zeitschrift für Physik*, **37** (1925), 863.
9) 新井朝雄：『ヒルベルト空間と量子力学』（共立出版，1997）の例 6.2 と 7 章の問題 8 を参照．
10) 9) の本の命題 6.7.
11) 新井朝雄・江沢 洋：『量子力学の数学的構造 II』（朝倉書店，1999）の定理 3.23.
12) 9) の本の定理 6.5 または 11) の本の系 3.6 を参照．
13) 11) の本の定理 3.68.
14) 詳しくは 9) の本の 4.3 節を参照．
15) 新井朝雄：『量子現象の数理』（朝倉書店，2006）の 3.2.3 項を参照．
16) J. von Neumann, *Math. Ann.*, **104** (1931), 570. 詳しい証明については，15) の本の 3.5 節を参照．
17) 15) の本の 3.6 節を参照．
18) 15) の本の命題 3.50 を参照．
19) A. Arai: *Rev. Math. Phys.*, **17** (2005), 1071.
20) A. Arai: *Lett. Math. Phys.*, **80** (2007), 211.
21) A. Arai, Y. Matsuzawa: *Lett. Math. Phys.*, **85** (2008), 15.
22) A. Arai: *Lett. Math. Phys.*, **85** (2008), 15; **89** (2009), 287.
23) A. Arai: *RIMS Kôkyûroku Bessatsu*, **B16** (2010), 1.
24) A. Arai, Y. Matsuzawa: *Rev. Math. Phys.*, **20** (2008), 951.
25) A. Arai: *Lett. Math. Phys.*, **87** (2009), 67.
26) 新井朝雄：『フォック空間と量子場』（上），（下）（日本評論社，2000）を参照．

（あらい・あさお，北海道大学大学院理学研究院）

*37) 漸化式が求められる．

量子古典対応
量子化の技法，古典系創発の機構



谷村 省吾

1. 古典力学と量子力学

編集部からいただいた仮題は「半古典論，量子古典対応」，それも「量子力学の数学的技法」という特集の中でという依頼で，どうして私に？と私が戸惑うのも無理はなく，そのようなテーマであれば量子力学に関わる数理的研究をされている方なら誰しも一家言をお持ちであり，谷村に執筆を任せるよりもふさわしい方々が全国におられるからである．そうは思うものの，せっかくいただいた題に乗って，私が読み聞きして知ったこと・考えていることをお話ししたい．

古典力学と量子力学をどう捉えるか？ まず名前と歴史から考えよう．**古典力学**（classical mechanics）というからには「古い力学」である．なぜそう呼ばれるかというと，それまでの力学とは一線を画する「新しい力学」がある時期に生まれたからである．新しい力学は**量子力学**（quantum mechanics）と言う．1900年頃から輻射（ふくしゃ）や原子の理論として**量子論**（quantum theory）が徐々に形成されていたが，1924年にBornが論文の題にQuantenmechanikと書いたのがこの言葉の初出らしい．1925年にBornとJordanが決定版とも言える論文を著し，再びこの言葉を題に掲げた．「これこそが原子の世界の真の力学法則だ」という自信と意気込みがBornにあったのだろう．当時JordanはBornの助手として量子力学の建設に加担する立場だった[1]．

古典力学という名称を誰が最初に使ったのか私はつきとめていないが，ともかく量子力学の出現に伴って，量子力学ではない力学は古典力学と呼ばれることになった．ただ「力学」というと意味が限定的に感じられるせいか，電磁気学や相対性理論は「古典論・古典物理」という範疇（はんちゅう）に入れられることが多い．ついでに量子力学以前の量子論は**前期量子論**（old quantum theory）とも呼ばれる．何かにつけ「古い」，「新しい」とレッテルを貼るのは品がないような気もするが，そういう習わしである．なお，古典力学は「古くて今では誰も研究しない力学」ではなく，現代でも利用されているのはもちろんのこと，今も研究され発展しつつある．

古典力学と量子力学の相違点を言う前に共通点を言おう．私は「力学」というものを「系・状態・物理量・値・運動」という5者の存在様式と関係を記述する理論だと規定したい[2]．力学の構文は「Aという系が，Bという状態にあるとき，Cという物理量は，Dという値をとる」という形式である．例えば「質量144 gのボールが時速120 kmで飛んでいるときエネルギーは80 Jである」という文は力学の文である．「水素原子が第1励起状態にあるとき電子の束縛エネルギーは3.4 eVである」という文も力学の構文にのっとっている．これらの例文には「運動」が現れていないが，運動とは状態の変化あるいは物理量の変化のことを言う．

古典力学と量子力学の相違点は何か？ 第一に対象とする系が違う．古典力学は惑星や振り子や流体など，人間の目に見え手に触れるような大きさの系を対象にする．量子力学は原子・電子・素粒子など，人間の通常の感覚では検知するのが困難であるような小さな系を対象にする．しかし目に見えるほどの大きな系でも古典力学では説明のつかない「巨視的量子効果」と呼ばれる挙動を示すことがあるので，「大きければ古典，小さければ量子」という分け方は絶対的なものではない．

第二に，物理量の代数構造が異なる．物理量にはスカラー倍・和・積などの演算規則があるが，古典力学の物理量の積は可換 $(AB = BA)$，量子力学の物理量の積は非可換 $(AB \neq BA)$ である．この点が両者の決定的な違いである．

この他に，古典力学ではエネルギーや角運動量の値

が連続的に変動できるが，量子力学では離散的な飛び飛びの値しか許されないという，連続値と離散値の違いがある．また，古典力学では系の状態を適切に調節すればすべての物理量の測定値を一意的に予測できるが，量子力学では状態をどう選んでもすべての物理量の測定値は一意的には決められず確率的なゆらぎを免れないという，決定論と確率論の違いもある．しかし，これらの差異もまた物理量代数の可換・非可換という差異に由来すると言ってよい．非可換代数に基づく力学は1925年のHeisenbergの行列力学に始まるが，以下ではSegal[3]が1947年に定式化した代数的量子力学の観点から古典力学と量子力学を対比させよう．

2. なぜ非可換だと離散値なのか？

力学では物理量（observable）と値（value）の概念を区別する．例えば「エネルギー」は物理量であり，「80 J」はエネルギーの値である．非可換なのは物理量の積であり，値の積ではない．物理量は抽象的なシンボルでしか表せないものだ．物理量 A, B の和 $A+B$ や積 AB や，複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ によるスカラー倍 λA が定められる．単位元と呼ばれる特別な元 $\mathbf{1}$ があり $A\mathbf{1} = \mathbf{1}A = A$ を満たす．線形性と結合律と分配律を満たす集合は**代数**と呼ばれる．さらに各元 A の共役 A^* が定まっていると **$*$（スター）代数**，各元 A のノルム $||A||$（非負実数）が定義され $||A^*A|| = ||A||^2$ という性質と完備性が備わっていると **$\mathbf{C}^*$（シースター）代数**と呼ばれる．物理量全体の集合は $*$ 代数になり，有界物理量全体の集合は C^* 代数になる．

物理量の値をどう定めるか？ 物理量代数 $\mathscr{A}$ の元 A に対し $AA' = A'A = \mathbf{1}$ となる $A' \in \mathscr{A}$ があれば A' を A の逆元という．しかし逆元は存在するとは限らない．とくに0には逆元が存在しない．物理量 A と複素数 c に対し $A - c\mathbf{1}$ の逆元が存在しないとき，c は A の**スペクトル値**（spectral value）であるという．ニュアンスとしては，「$A - c\mathbf{1}$ の逆元がない」ことは「$A - c\mathbf{1}$ の値が0になることがある」つまり「A の値が c になることがある」と解釈できる．A のスペクトル値全体の集合を $\sigma(A)$ と書く．

スペクトル値は一つの物理量 A だけで決まるものではなく，物理量代数 $\mathscr{A}$ によって決まる[4]．スペクトル値は「$A - c\mathbf{1}$ の逆元が代数 $\mathscr{A}$ の中にあるかないか」という条件で規定されるからだ．

可換代数の例を挙げると，Q, P は $Q^* = Q$, $P^* = P$ と $[Q, P] := QP - PQ = 0$ を満たす物理量で，そのスペクトル集合は $\sigma(Q) = \sigma(P) = \mathbb{R}$（実数全体）だとする．このとき調和振動子のエネルギーと呼ばれる物理量

$$H := \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 Q^2 \tag{1}$$

のスペクトルは $\sigma(H) = [0, \infty)$（非負実数全体）になる．ここで m, ω は正の実数である．P も Q も連続的な実数値をとるとしたら H が連続的な非負の実数値をとるのは当たり前に見える．

ところが $[Q, P] = 0$ という仮定を $[Q, P] = i\hbar\mathbf{1}$（$\hbar$ は正の実数）で置き換えて非可換代数に移行すると，$\sigma(Q) = \sigma(P) = \mathbb{R}$ であっても H のスペクトルは

$$\sigma(H) = \left\{ \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \middle| \, n = 0, 1, 2, \cdots \right\} \tag{2}$$

という離散値に限られる．物理量としての H は式 (1) で定められているが，H の値はたんに「P の値と Q の値を2乗して足した値」ではない．

同様に，物理量 Q_j, P_j $(Q_j^* = Q_j, P_j^* = P_j; j = 1, 2)$ から角運動量と呼ばれる物理量

$$L := Q_1 P_2 - Q_2 P_1 \tag{3}$$

を定めると，可換代数の中では L のスペクトルは $\sigma(L) = \mathbb{R}$ である．しかし，Q_j, P_j が

$$[Q_j, Q_k] = 0, \qquad [P_j, P_k] = 0,$$
$$[Q_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}\mathbf{1} \tag{4}$$

を満たす非可換量だとすると L のスペクトルは $\sigma(L) = \hbar l$ $(l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ となる．つまり，同じ式 (3) で規定される物理量 L であっても，それが可換代数の中にあるか非可換代数の中にあるかによって，L が取り得る値は連続になったり離散になったりする．

実数や複素数は可換代数をなす．物理量代数が可換ならば物理量の演算とスペクトル値の演算は準同形対応がつくが，物理量代数が非可換な場合は，物理量の演算とスペクトル値の演算は対応がつかず，スペクトル値は物理量の定義式から素朴に予想される値とは食い違ってくる．

3. なぜ非可換だと確率論なのか？

この表題の言い方は不正確で，正しくは，可換代数でも確率論を使う場面はあるが，非可換代数では確率論の使用が不可避になると言うべきである．

前節で物理量のスペクトル値という概念を導入したが，じつは値には2種類の値があり，もう一つは期待

値と呼ばれる．各物理量 $A \in \mathscr{A}$ に値 $\nu(A) \in \mathbb{C}$ を対応させる写像 $\nu: \mathscr{A} \to \mathbb{C}$ が任意の $\lambda \in \mathbb{C}$ と任意の $A, B \in \mathscr{A}$ に対して

$$\nu(\lambda A) = \lambda\, \nu(A), \tag{5}$$

$$\nu(A+B) = \nu(A) + \nu(B), \tag{6}$$

$$\nu(A^*A) \in \mathbb{R} \text{ かつ } \nu(A^*A) \geq 0, \tag{7}$$

$$\nu(\mathbf{1}) = 1 \tag{8}$$

を満たしていれば ν を物理量代数 $\mathscr{A}$ 上の**状態**（state）といい，$\nu(A)$ を物理量 A の**期待値**（expectation value）という．

状態 χ が $\chi(AB) = \chi(A)\chi(B)$ も満たしていれば χ を $\mathscr{A}$ 上の**指標**(character)という．指標の値 $\chi(A) = c$ は A のスペクトル値である．なぜなら $A - c\mathbf{1}$ の逆元 T が存在したとすると $T(A - c\mathbf{1}) = \mathbf{1}$ となり，これを指標に代入すれば

$$\chi(T(A - c\mathbf{1})) = \chi(\mathbf{1}) = 1$$

となるが，この式の左辺は，$\chi(A) = c$ を代入すると

$$\begin{aligned}\chi(T(A - c\mathbf{1})) &= \chi(T)\,\chi(A - c\mathbf{1}) \\ &= \chi(T)\,(\chi(A) - c) \;=\; 0\end{aligned}$$

となるので矛盾を生ずる．従って $A - c\mathbf{1}$ の逆元は存在せず，$\chi(A) = c$ は A のスペクトル値である．そうすると**指標状態** $\chi: \mathscr{A} \to \mathbb{C}$ は各物理量 A にスペクトル値 $\chi(A)$ を割り当てる写像であり，すべての物理量の値が一意的に確定している状態だと言える．

しかし，一般に非可換代数に対する指標は存在しない．例えば正準交換関係 $[Q, P] = i\hbar\mathbf{1}$ で定まる代数に対して指標 χ がもしあれば

$$\begin{aligned}0 &= \chi(Q)\chi(P) - \chi(P)\chi(Q) \\ &= \chi(QP - PQ) = \chi(i\hbar\mathbf{1}) = i\hbar\end{aligned}$$

となって矛盾を生ずる．ゆえに Q と P に同時にスペクトル値を割り当てるような指標状態は存在しない．

可換代数 $\mathscr{A}$ に対しては指標が存在する．しかも指標全体の集合 $Sp(\mathscr{A})$ に適当な位相を入れると，任意の物理量 A は $Sp(\mathscr{A})$ 上の連続関数

$$\check{A}: Sp(\mathscr{A}) \to \mathbb{C}, \quad \chi \mapsto \check{A}(\chi) := \chi(A) \tag{9}$$

とみなせる（Gelfand–Naimark の双対性）．また，任意の状態 ν に対し

$$\nu(A) = \int_{Sp(\mathscr{A})} \chi(A)\rho_\nu(\chi)d\chi \tag{10}$$

となる確率測度 ρ_ν が一意的に存在する（Riesz–Radon–Markov の表現定理）．つまり状態 ν は確率 $\rho_\nu(\chi)$ の重みで指標状態 χ が混合した状態だと解釈できる．

非可換代数 $\mathscr{A}$ に対しては指標は存在しないのが普通だが，それでも $\mathscr{A}$ の可換部分代数 $\mathscr{M}$ に限定すれば指標は存在し，物理量 $A \in \mathscr{M}$ は (9) と同様に関数 $\check{A}: Sp(\mathscr{M}) \to \mathbb{C}$ とみなせる．とくにただ一つの物理量 A に注目すれば A が生成する代数 $\mathscr{G}(A)$ は必ず可換代数なのでこれに対する指標があり，スペクトル値 $\chi(A)$ の出現確率が (10) の $\rho_\nu(\chi)$ で定められる．このことは (10) の $\nu(A)$ を「平均値」と解釈することと整合している．物理的には，同一の状態 ν の系を多数用意して，それぞれに対して物理量 A の測定を行うと，A のスペクトル値のうちのどれかが測定値として得られ，そうして集めた測定値の平均が期待値になる．

念のために言うが，非可換な量 A, B に対しては，一般に A, B のスペクトル値 a, b に対して $\nu(A) = a$ かつ $\nu(B) = b$ となるような状態 ν は存在しない．両方の物理量の値が確定した状態がないのは不確定性関係の一種である．しかも「$A = a$ かつ $B = b$ が得られる確率」を定義することもできない．確率的にでも A, B が同時に何らかの値を持っていると想定すると，量子力学と矛盾し，かつ実験で否定される命題（例えば Bell の不等式）が導かれる[2)]．

4. 量子化の技法

歴史的には古典力学では説明のつかない原子や輻射の現象を説明するために量子力学が創られたわけだが，量子力学は古典力学とは無関係に創られたのではなく，古典力学を足掛かりにして**量子化**（quantization）という手順を踏んで構築された．もともと量子化という言葉はエネルギーなどの物理量の値が飛び飛びの離散値に限定されることを指しており，その離散値を決める条件を「量子条件」と呼んでいた．Bohr, Wilson, 石原, Sommerfeld の量子論はそういうものだった（日本人も先駆的な研究をしていたのである）[1)]．

Born, Jordan, Dirac によって古典力学から量子力学に移行する明確な手続きが与えられた．それは可換代数を非可換化する手続きである．どんな可換代数でも量子化できるわけではなく，当初与えられたのは正準構造を持つ古典力学系の量子化である．

正準古典力学系は偶数次元空間 $\mathbb{R}^{2s}$ を状態空間とし，$\mathbb{R}^{2s}$ 上の微分可能関数を物理量とし，それらのスカラー倍・和・積で定まる代数を持ち，Poisson 括弧が

定義されている．$\mathbb{R}^{2s}$ の座標を $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=(q_1,\cdots,q_s,p_1,\cdots,p_s)$ とすると，物理量はこれらを変数とする実数値（あるいは複素数値）関数 $u(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}),v(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ であり，これらの Poisson 括弧は

$$\{u,v\}:=\sum_{j=1}^{s}\left(\frac{\partial u}{\partial q_j}\frac{\partial v}{\partial p_j}-\frac{\partial u}{\partial p_j}\frac{\partial v}{\partial q_j}\right) \tag{11}$$

で定義される．Dirac 流の量子化は，関数 u,v に抽象的な記号 $\hat{u},\hat{v}$ を対応させ，

$$[\hat{u},\hat{v}]=i\hbar\widehat{\{u,v\}} \tag{12}$$

が成り立つことを要請する．左辺は交換子 $[\hat{u},\hat{v}]=\hat{u}\hat{v}-\hat{v}\hat{u}$ である．物理量は Planck 定数と Poisson 括弧の分だけ非可換だ，という式である．不思議だが，このように Poisson 括弧を交換子で置き換えた非可換代数で調和振動子や水素原子のエネルギーのスペクトル値を計算してみると，実験測定値と，また前期量子論で計算された値と完全に一致したのである．

厳密に言うと，すべての $u,v\in C^\infty(\mathbb{R}^{2s})$ について条件 (12) を満たす写像 $u\mapsto\hat{u}$ は存在しないことが証明されている（Groenewold–van Hove の定理[5]）．表現空間の有限可約性を仮定すると $[\widehat{q^3},\widehat{p^3}]=3[\widehat{q^2p},\widehat{qp^2}]$ という式が導かれ，これが矛盾を生ずる．要するに高次の多項式について条件 (12) を整合的に満たすことができないのである．従って (12) はあくまで「非可換化の指針」と呼ぶべきものであり，実際には 1 次式の交換子 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar\hat{1}$ だけを用いて非可換代数を定める．そのため q,p の 2 次以上の多項式あるいは級数による変数変換は非可換代数の同形写像にならないという不便さがある．

Born–Jordan–Dirac 流の量子化は，物理量代数という視点から古典力学と量子力学が地続きであることを明らかにした．また，前期量子論で扱われた静力学的なスペクトル値の計算問題だけでなく，一般的な運動方程式を書いてダイナミクスを扱うことも可能にした．さらに場の量子論への拡張の地平をも切り開いた．

Groenewold–van Hove の定理の前提条件であった有限可約性という制約を取り払ってでも量子化の指針 (12) を忠実に守ろうとする試みとして**幾何学的量子化**（geometric quantization）[6] と，(12) の条件を緩めて非可換化する試みとして**変形量子化**（deformation quantization）[7] がある．どちらも一長一短あるが，変形量子化のほうは関数 $u(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}),v(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ の**スター積**（star product）$u*v$ を定める．$u*v$ は $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},\hbar)$ の関数である．スター積は結合律や

$$\lim_{\hbar\to 0}(u*v-v*u)=0, \tag{13}$$

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}(u*v-v*u)=\{u,v\} \tag{14}$$

を満たすとする．これらは $\hbar\to 0$ の極限で成立すればよいので，有限の大きさの $\hbar$ に対する Dirac の量子条件 (12) よりは緩い条件になっている．スター積は一意的に存在することが証明されており，古典力学の可換代数の非可換化としてはなかなかよい路線のように思えるが，スター積代数は C* 代数にはならないことが知られており，量子力学の構成としては不満足な段階にとどまる．

もう一つ量子化（非可換化）の方法として Mackey の**非原始的系**（imprimitivity system）がある[8]．この名称は言いにくいので Mackey 系と呼ばせてもらおう．測度空間 $(M,\mathfrak{B},\mu)$ に位相群 G が推移的かつ保測的に作用して，Borel 集合 $\Delta\in\mathfrak{B}$ ごとに $P(\Delta)$ と，$g\in G$ ごとに $U(g)$ というシンボルがあり，

$$P(\Delta)^*=P(\Delta), \tag{15}$$

$$P(\Delta_1\cap\Delta_2)=P(\Delta_1)P(\Delta_2), \tag{16}$$

$$\Delta_1\cap\Delta_2=\varnothing \Rightarrow P(\Delta_1\cup\Delta_2)=P(\Delta_1)+P(\Delta_2), \tag{17}$$

$$P(M)=\mathbf{1}, \tag{18}$$

$$U(g)P(\Delta)U(g)^*=P(g\Delta) \tag{19}$$

が成り立つとき $P(\Delta),U(g)$ $(\Delta\in\mathfrak{B},\ g\in G)$ で生成される代数を Mackey 系と呼ぶ．$P(\Delta)$ $(\Delta\in\mathfrak{B})$ は可換代数を生成し，従って確率解釈が可能で，$P(\Delta)$ は領域 $\Delta\subset M$ に粒子が見つかる確率を与える．とくに関係式 (19) が空間の対称性と代数の非可換性を特徴付ける．Euclid 空間 $M=\mathbb{R}^s$ に平行移動群 $G=\mathbb{R}^s$ が作用している場合の (19) は正準交換関係に他ならない．Mackey の方法は質点の量子力学の定式化としては非常に完成度が高い[8]．

5. 古典化の機構

我々の世界は量子力学で閉じているわけではなく，現実には古典力学で記述できる系が存在している．量子力学の方が基本的な理論であるなら，何らかの意味で量子力学から古典力学が導出されるべきである．

量子から古典へという方向性として**対応原理**あるいは**古典極限**という考え方がある．エネルギーのスペクトル値に小さいものから順に付けた番号を**量子数**と言

う．標語的に言えば「量子数が大きくなると量子系の挙動は古典力学的な挙動に近づいてくる」というのが対応原理である．これは原理と言うよりは量子力学を構築する上での目標宣言であり，量子力学ができ上がった今となっては字句通りに受け止めてよいか微妙である．

量子数が極端に大きな原子は **Rydberg**（リュードベリ）**原子**と呼ばれる．実験室では量子数 $n = 50 \sim 100$ の原子が作られており，電子の運動は古典力学の Kepler 運動に近づいてくる．希薄な宇宙空間ではもっと大きな量子数の原子が安定して存在し，量子数 $n = 600 \sim 700$ の原子が確認されている[9]．原子半径は n^2 に比例するので，これほどの高励起状態の原子の半径は 0.02 mm ほどになっている（人の髪の毛の直径は約 0.08 mm）．

数学的には，量子数が大きいときの波動関数の漸近挙動を古典力学を援用して解析する方法として WKB 近似がある．Sommerfeld の量子条件を精密化した Maslov 量子化という半古典論的方法もあり，特性類・トレース公式・擬微分作用素などとの関係も深い[10]．

以上は高エネルギー状態の漸近挙動を通して量子力学から古典力学を再現しようというアプローチだが，物理量代数の視点に戻ると，いかにして量子的非可換代数から古典的可換代数が出現するか？ という疑問が浮かぶ．この点については Hepp, Wightman, 小嶋などが，対称性の自発的破れに伴う**秩序変数**（order parameter）が古典力学的物理量の役割を演じることを論じている[11]．秩序変数は，相転移に伴って生じる非同値な基底状態を分類する変数であり，例えば強磁性体（永久磁石）の中の莫大な数の電子のスピンの向きがそろっている度合いを表す．Anderson は秩序変数の「ゆらぎない固さ」という特性を**一般化剛性**（generalized rigidity）と呼んだ[12]．低エネルギー基底状態は長波長の現象に対応するし，Lanford と Ruelle が秩序変数を**無限遠方の物理量**（observable at infinity）と規定したように，秩序変数の現れ方はマクロなスケールで古典力学変数が顕在化するという経験則と合致している．

秩序変数・可換代数の出現機構の概略を述べると[2]，物理量代数と状態から GNS 構成という手続きを通して物理量 $A \in \mathscr{A}$ の表現演算子

$$\pi(A)=\begin{pmatrix} \pi_1(A) & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \pi_2(A) & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \pi_3(A) & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \qquad (20)$$

が定まる．各 π_i は代数 $\mathscr{A}$ の既約表現．そうすると

$$Z = \begin{pmatrix} z_1\mathbf{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & z_2\mathbf{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & z_3\mathbf{1} & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}, \quad z_i \in \mathbb{C} \qquad (21)$$

はすべての $\pi(A)$ と可換な演算子であり，このような Z を秩序変数という．各 z_i が，量子的なゆらぎのない，古典力学的な値になっている．すべての $z_i \in \mathbb{C}$ について Z を集めた集合は可換代数をなす．とくに無限自由度の正準交換代数系には非同値表現が存在し，$\pi_1 \neq \pi_2$ となり，$z_1 \neq z_2$ であるような非自明な秩序変数が現れる余地がある[11]．また，正準交換代数では表せない多様体上の量子力学は，有限自由度であっても非同値表現を持ち，磁場などの古典力学変数を顕在化させる[2,8]．注目すべきは，量子系を定める物理量代数と状態だけを材料にして，外から何も追加することなく可換代数が出現した点である．

小嶋はこの視点をさらに精密化・双方向化し，量子系から古典系が創発する向きと，古典系によって量子系が観測・記述・制御される向きの相互関係を**ミクロ・マクロ双対性**（Micro-Macro duality）と呼んでいる[13]．

量子系から古典系へ移行する道筋として**デコヒーレンス**（decoherence）という概念がある[14]．量子系の特徴として重ね合わせの原理と干渉性があるが，この性質が失われることをデコヒーレンスという．これもまた非対角的で非可換な (20) から対角的で可換な (21) への移行として理解できる．量子化は一方的なものではなく，古典化への道筋も開けている．

6. 量子が先か？ 古典が先か？

物理世界の基本構成要素がミクロ量子系であることは疑いようがなく，古典力学よりも量子力学のほうが論理的にも宇宙史的にも先行するのは真実だろう．一方で，決定論的・古典論的物理観が我々の世界で成立していることも確かであり，そういう視点や言語がなければそもそも量子力学を語ることすらできなかったであろう．量子論の建設者の一人である Bohr はこの点を強調していた[15]．Bohr は，量子力学が絶対的に正しく，古典力学はその近似理論にすぎない，というような考え方をしていなかった．量子・古典の両方がそろって対峙しているのが自然界のありようだと考えていた．今でも Bohr の思想は生きていると思う．

Berezin は量子化を圏論の関手という概念で捉えた[16]．古典と量子の関係は集合・写像の概念では捉えきれず，多対多対応まで含めて記述できる柔軟な数学言語が必要であり，その候補として圏論を使ったということだろう．最近 Döring と Isham はトポスを用いて理論物理全体の再定式化を企図している[17]．物理を語る数理言語を開拓する挑戦は今も続いている．

21 世紀に入り，古典力学も量子力学も成熟期を迎えたかに見えるが，両者の意義を見直し，調和を回復することは 21 世紀ならではの課題であろう．

参考文献

1) 広重徹『物理学史 II』培風館 (1968); M. ヤンマー（小出昭一郎訳）『量子力学史 1, 2』東京図書 (1974); 石井茂『ハイゼンベルクの顕微鏡—不確定性原理は超えられるか』日経 BP 社 (2005); 佐々木隆「ハイゼンベルグ方程式」数理科学 2009 年 6 月号 p.24; 谷村省吾「ハイゼンベルク方程式を最初に書いた人はハイゼンベルクではない」素粒子論研究（電子版：ネット閲覧可）10 巻 (2011).

2) 谷村省吾「21 世紀の量子論入門」理系への数学（現代数学社）2010 年 5 月以降連載; GNS 構成 2010 年 6 月号，確率論・Gelfand-Naimark 双対 7–10 月号，Bell の不等式 12 月号，対称性の破れ 2011 年 4–5 月号.

3) I.E. Segal, "Irreducible representations of operator algebras", *Bull. Amer. Math. Soc.* **53**, 73 (1947); "Postulates for general quantum mechanics", *Ann. Math.* **48**, 930 (1947); 梅垣壽春，大矢雅則，日合文雄『作用素代数入門』共立出版（1985, 復刊 2003); 大矢雅則，小嶋泉編著『量子情報と進化の力学』牧野書店 (1996) 第 I 部第 2 章.

4) 河東泰之「作用素環論」数学セミナー 2004 年 1 月号 p.27. 単独の作用素ではなく作用素の集まりが環になって醸し出す性質を調べるのが作用素環論だという意味のことを語っている.

5) R. Abraham and J.E. Marsden, *Foundations of Mechanics*, AMS Chelsea Pub, 2nd ed. (2008), Theorem 5.4.9.

6) N. Woodhouse, *Geometric Quantization*, Clarendon, Oxford (1980).

7) F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, and D. Sternheimer, "Deformation theory and quantization I-II", *Ann. Phys.* **111**, 61–151 (1978).

8) G.W. Mackey, *Induced Representations of Groups and Quantum Mechanics*, Benjamin (1968); Y. Ohnuki and S. Kitakado, "Fundamental algebra for quantum mechanics on S^D and gauge potentials", *J. Math. Phys.* **34**, 2827 (1993); D. McMullan and I. Tsutsui, "On the emergence of gauge structures and generalized spin when quantizing on a coset space", *Ann. Phys.* **237**, 269 (1995); S. Tanimura and I. Tsutsui, "Induced gauge fields in the path-integral", *Mod. Phys. Lett. A* **10**, 2607 (1995).

9) 松澤通生「膨脹した原子：高リュードベリ状態のダイナミクス」日本物理学会誌 1986 年 5 月号 p.402.

10) V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk, *Semi-Classical Approximation in Quantum Mechanics*, Reidel Pub. (1981); A. Sugita, "Semiclassical trace formulas in terms of phase space path integrals", *Ann. Phys.* **288**, 277 (2001).

11) O.E. Lanford and D. Ruelle, "Observables at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics", *Comm. Math. Phys.* **13**, 194 (1969); K. Hepp, "Quantum theory of measurement and macroscopic observables", *Helv. Phys. Acta* **45**, 237 (1972); A.S. Wightman, "Superselection rules; old and new", *IL Nuovo Cim. B* **110**, 751 (1995); G.L. Sewell, *Quantum Mechanics and Its Emergent Macrophysics*, Princeton University (2002), 2.6.5 節；I. Ojima, "A unified scheme for generalized sectors based on selection criteria", *Open Sys. Info. Dyn.* **10**, 235 (2003).

12) P.W. アンダーソン〔対称性の破れと，剛性と観測の理論の間にある，むしろ深い関連性ついて注意しておきたい…(中略)…標準的な実験には，すべて固い装置…古典的に振る舞う物体すなわち対称性の破れたものが関係している.〕『凝縮系物理学の基本概念』p.61, 吉岡書店 (1985); 〔一つ一つの電子にとって，実験装置—シュテルン・ゲルラッハの磁石やスリットなど—というものは，我々が電子の性質を見る場合に比べて，遥かに不可思議に見えるはずです．これらの物体は電子に対して単に境界条件としてしか作用せず，自分自身の量子状態が変化することがない，という不思議な性質を備えているのです.〕東京大学学内広報 No.1254, p.6, 2003 年 1 月（ネット閲覧可）.

13) I. Ojima, "Micro-Macro duality in quantum physics", arXiv math-ph/0502038（会議録論文）; 小嶋泉，谷村省吾「双対性をめぐる物理学対話—量子と古典，ミクロとマクロ」別冊・数理科学『双対性の世界』p.34 (2007); 小嶋泉「代数的量子論とミクロ・マクロ双対性」数理科学 2007 年 7 月号 p.18.

14) ウォイチェシ・ズーレク（町田茂訳）「非干渉化：量子論から古典論へ」パリティ 1992 年 5 月号 p.8. W. Zurek, "Decoherence and the transition from quantum to classical", *Physics Today* (1991) の記事だったが増補版が arXiv に出ている：quant-ph/0306072. 〔古典性は量子系の選ばれた物理量から創発する性質でなくてはならない〕と述べている.

15) ニールス・ボーア（山本義隆編訳）『因果性と相補性』岩波書店 (1999), p.223, 267.

16) F.A. Berezin, "General concept of quantization", *Comm. Math. Phys.* **40**, 153 (1975).

17) A. Döring and C.J. Isham, "A topos foundation for theories of physics I-IV", *J. Math. Phys.* **49**, 053515–053518 (2008).

（たにむら・しょうご，名古屋大学大学院情報科学研究科）

量子力学の未解決問題と数学

小澤　正直

1900 年のプランクの量子仮説の発見を契機として，光と物質の相互作用に関して古典力学とは相容れない多くの仮説が現れた．それらを体系化する「量子力学」は，1925 年のハイゼンベルクによる行列力学の発見によって生まれた*1)．

プランクの量子仮説は，振動子のエネルギーがとびとびの値しかとらないことを意味する．量子力学誕生に関わる，当時の未解決問題は，位置や運動量のような連続的変数の多項式であるエネルギーがなぜとびとびの値しかとらないのかということであった．

単位質量をもち，振動数 ν の 1 次元調和振動子のエネルギーは，位置 Q と運動量 P の 2 次形式 $H(Q,P) = \frac{1}{2}(P^2 + 4\pi^2\nu^2Q^2)$ である．時空間は連続的だから，位置 Q と運動量 P は連続的変数，つまり，実数全体に値を持つ変数である．問題は，連続的変数 Q, P の 2 次形式 $H(Q,P)$ がどうして離散的変数になるかということである．こういう問題が難しいのは，問題の前提をどこまで変えていいのかが，あらかじめわかっていないからである．

ハイゼンベルクの発見によってこの問題がどう解決されたかは，興味深い．物理量は実変数で表されるというそれまでの前提を覆し，物理量は無限次のエルミート行列で表され，取り得る値はその固有値であるという仮説を導入する．すると，位置と運動量を表す行列 Q, P が交換関係

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi i}I \tag{1}$$

を満たすと，Q, P はともに実数全体を値として取り得るのに，$H(Q,P)$ は離散的な値 $h\nu(n+\frac{1}{2})$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ しかとらないことが示される．ただし，h はプランク定数，I は無限次の単位行列である．

このように，非可換性，つまり，物理量の演算が必ずしも乗法の交換法則を満たさないという仮説からプランクの量子仮説が導かれたのである．

ハイゼンベルクが解決を目指した次の問題は，この非可換性の操作的意味は何かということであった．これには，アインシュタインの「何が測定可能かはその理論自身が決めるべきだ」というコメントを指針にしたと伝えられる．1927 年に有名なガンマ線顕微鏡の思考実験から導かれた結論は，非可換な物理量である位置 Q と運動量 P を同時に正確に測定することはできず，その測定誤差 $\epsilon(Q), \epsilon(P)$ には

$$\epsilon(Q)\epsilon(P) \sim h \tag{2}$$

という関係があるということであった．この関係は，ハイゼンベルクの不確定性原理と呼ばれる．

従来の古典力学では，初期時刻における位置と運動量がわかれば，未来の運動状態を一意的に予言することができ，「ラプラスの悪魔」で象徴される決定論的な世界観が生まれた．しかし，不確定性原理により，初期時刻における位置と運動量を正確に知ることができないため，微視的スケールでは世界が非決定論的であることが明らかになった．

以下では，長いこと未解決であった不確定性原理の数学的基礎付けの問題について解説しよう．ハイゼンベルクの論文が出た後でケナードは，任意の状態において位置の標準偏差 $\sigma(Q)$ と運動量の標準偏差 $\sigma(P)$ の間に

$$\sigma(Q)\sigma(P) \geq \frac{h}{4\pi} \tag{3}$$

という関係が成り立つことを示した．その後，多くの教科書でこの関係はハイゼンベルクの関係 (2) の数学的表現であると説明した．しかし，標準偏差の概念は，測定装置の性質と独立な概念であり，この関係から測

*1)　シュレーディンガーが波動力学を発見したのは，1926 年であり，ほどなく両者は同等であることが示されている．行列力学の発見と展開については文献 1) を参照．

定誤差の関係 (2) が導かれる理論的根拠は明らかにされなかった．にも関わらず，ハイゼンベルクの関係 (2) の正当性に関する吟味は，長いこと不問に付されてきた．というのも，右辺のプランク定数は極めて小さな量であり，この関係を検証できるほど精密な測定技術がなかったためである．

1970 年代末に量子光学の技術を利用して重力波の検出を試みるというプロジェクトが計画されたときに，ハイゼンベルクの不確定性原理から標準量子限界と呼ばれる検出限界が導かれるという主張が半ば定説として広まった．ところが，1983 年にユエンによって，収縮状態測定という新しい測定法によって標準量子限界が打破可能であると主張され，標準量子限界を主張するケーブスとの間で論争が生まれた．

この論争は，量子測定理論に関する筆者の研究によって，標準量子限界を打破する収縮状態測定が実現可能であることが明らかにされ，1988 年に決着した[2,3]．その結果，収縮状態測定のような有用な測定法がハイゼンベルクの関係式 (2) と矛盾することが明らかになり，不確定性原理を正しく表現する普遍妥当性を持った関係式の必要性が明らかになった．

この課題に対して，2003 年に，任意の状態において，2 つの物理量 A, B の同時測定の誤差 $\epsilon(A), \epsilon(B)$ の間に

$$\epsilon(A)\epsilon(B)+\epsilon(A)\sigma(B)+\sigma(A)\epsilon(B) \geq \frac{1}{2}|\langle AB-BA\rangle| \tag{4}$$

という関係が普遍的に成り立つことが，一般的な量子測定理論から証明された[4,5]．ただし，σ は測定直前の標準偏差を，$\langle\cdots\rangle$ は期待値を表す．この不等式の形は，これまで想定されたことがなかったもので，小澤の不等式と呼ばれるようになった．交換関係 (1) から，位置 Q と運動量 P の同時測定に関しては，

$$\epsilon(Q)\epsilon(P)+\epsilon(Q)\sigma(P)+\sigma(Q)\epsilon(P) \geq \frac{h}{4\pi} \tag{5}$$

が成り立つ．

この定量的表現では，標準偏差 $\sigma(Q)$ または $\sigma(P)$ が無限大ならば，測定誤差 $\epsilon(Q), \epsilon(P)$ を共に無限小にできるので，位置と運動量が同時測定可能な例外的な場合が許容されている．実はそのような可能性は，以前から知られていた．それは，アインシュタイン，ポドルスキー，ローゼンによって発見された 2 粒子系の EPR 状態において，粒子 1 の位置と粒子 2 の運動量を測ることによって，粒子 1 の位置と運動量の同時測定が可能であるというシュレーディンガーの指摘として知られている[6]．従って，不確定性原理の定性的表現としては，「位置と運動量は正確な同時測定が不可能である」という主張の前に「位置と運動量の標準偏差がともに有限な状態においては」という但し書きが必要であることがわかった．

また，小澤の不等式の第 1 項だけを含むハイゼンベルク型不等式と小澤の不等式の比較対照実験は，重要な課題とされてきたが，最近，ウィーン工科大学の長谷川グループと小澤の共同研究によって中性子スピン測定において，小澤の不等式は成立しているが，従来のハイゼンベルク型不等式は破れていることを示す検証実験に成功した[7]．

このように，小澤の不等式は，不確定性原理に対するこれまでの観念を大きく変える可能性を秘めている．収縮状態測定のようにこれまで不可能とされた測定法の可能性が明らかにされるなど，精密測定技術や量子度量衡学への応用の他，量子計算の精度限界の解明，量子暗号への応用等の研究が進められている．

近年，数学と諸科学の連携が様々な方法で推進されるようになった．多くの場合，境界をまたいでの連携が強調され，解決すべき問題をいかに一方の分野から他方の分野に伝達するかということに関心が払われているようである．本稿を振り返ると，量子力学と数学の境界は曖昧であって，未解決問題は解決されるまで意味のある形では言語化できなかったと言えよう．数学が諸科学に対して有用であるためには，境界を取り払い，数学の方法と諸科学の問題を同時に身につける研究教育環境の構築が豊かな将来を招くように思われる．

参考文献

1) B.L. van der Waerden (Ed.), *Sources of Quantum Mechanics*, Dover, New York, 1968.
2) M. Ozawa, *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988) 385.
3) J. Maddox, *Nature* **331** (1988) 559.
4) M. Ozawa, *Phys. Rev. A* **67** (2003) 042105.
5) M. Ozawa, *Int. J. Quant. Inf.* **1** (2003) 569.
6) E. Schrödinger, *Naturwissenshaften* **23** (1935) 807, 823, 844.
7) J. Erhart, S. Sponar, G. Sulyok, G. Badurek, M. Ozawa, Y. Hasegawa, *Nature Physics*, DOI:10.1038/NPHYS2194 (2012).

（おざわ・まさなお，名古屋大学大学院情報科学研究科）

経路積分

時間分割近似法による経路空間上の解析として

熊ノ郷 直人



1. 序

1942 年，Feynman[3] は Schrödinger 方程式

$$\left(i\hbar\partial_T + \frac{\hbar^2}{2}\triangle - V(T,x)\right)u(T,x) = 0\,,$$

$$u(0,x) = v(x)\,,\quad T>0\,,\ x\in\mathbf{R^d}$$

の初期値 $v(x)$ と解 $u(T,x)$ に対して

$$u(T,x) = \int_{\mathbf{R}^d} K(T,x,x_0)v(x_0)dx_0$$

となる基本解 $K(T,x,x_0)$ を**経路積分**を用いて

$$K(T,x,x_0) = \int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}\mathcal{D}[\gamma] \qquad (1)$$

と表した．ここで $0<\hbar<1$ は **Planck パラメータ**，$\gamma:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ は $\gamma(0)=x_0$ と $\gamma(T)=x$ となる経路（図 1），$S[\gamma]$ は経路 γ に沿った作用

$$S[\gamma] = \int_0^T \left(\frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{dt}\right|^2 - V(t,\gamma(t))\right)dt$$

である．Feynman は経路積分 $\int \sim \mathcal{D}[\gamma]$ を “すべての経路 γ に関する新しい和” であると主張し，有限次元積分の極限として説明した．この方法は現在，**時間分割近似法**と呼ばれる．さらに Feynman は一般的な汎関数 $F[\gamma]$ を振幅とする経路積分

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma] \qquad (2)$$

（$F[\gamma]=1$ **の場合** (1) **となる**）を考え，経路積分と汎関数微分からなる経路空間上の解析学を提案し，Hamilton 形式で定式化されていた量子力学に，Lagrange 形式による定式化を与えた[4, §7)17, §8]．

しかし 1960 年，Cameron[2] は経路積分の測度が数学的に存在しないことを証明した．数学において，測度を用いると積分の存在，さらに極限と積分の順序交換，2 つの積分の順序交換など積分の性質が保証できるが，経路積分ではこうした議論が不可能となる．

ゆえに本稿では時間分割近似法を用いて，経路積分 (2) が数学的に存在することについて述べる．言い換えると，経路積分 (2) の時間分割近似法が終点 x と始点 x_0 に関して $\mathbf{R}^{2d}$ 上で広義一様収束する**一般的な汎関数** $F[\gamma]$ **のクラス** $\mathcal{F}$ **を与える．**

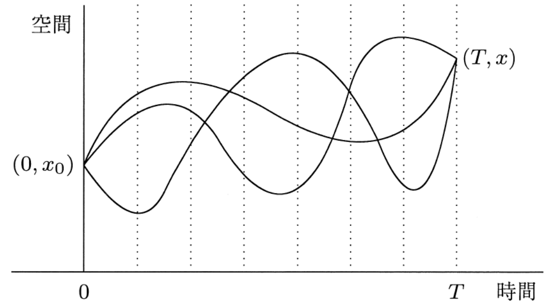


図 1 “すべての経路 γ に関する和” とは？

経路積分 (1) の数学的定式化として，時間分割近似法[5, 16] 以外にも，測度の解析接続[16]，無限次元振動積分[1, 11]，ホワイトノイズ[8]，超準解析[15] など様々なアプローチがあり，既に優れた解説[9, 10] がある．本稿では (1) の時間分割近似法[5] を (2) に一般化した理論[6, 7, 13] を解説[14] する．

2. 経路積分の定義と存在

本稿ではポテンシャル $V(t,x)$ に次を仮定する．

仮定 1（ポテンシャル） 実数値関数 $V(t,x):\mathbf{R}\times\mathbf{R}^d\to\mathbf{R}$ は任意の多重指数 α に対し，$\partial_x^\alpha V(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し，$|\partial_x^\alpha V(t,x)| \le C_\alpha(1+|x|)^{\max(2-|\alpha|,0)}$ とする．

まずクラス $\mathcal{F}$ に属する汎関数 $F[\gamma]$ の例をあげる．

例 1（$F[\gamma]\in\mathcal{F}$ の例） m は非負整数とする．

(*a*) 関数 $B(t,x):\mathbf{R}\times\mathbf{R}^d\to\mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対し，$\partial_x^\alpha B(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し，$|\partial_x^\alpha B(t,x)| \le C_\alpha(1+|x|)^m$ とする．このとき，時刻 t での値

$$F[\gamma] = B(t,\gamma(t)) \in \mathcal{F}.$$

特に，$F[\gamma]=1\in\mathcal{F}$.

(*b*) $0\le T'\le T''\le T$ のとき，Riemann 積分

$$F[\gamma] = \int_{T'}^{T''} B(t,\gamma(t))dt \in \mathcal{F}.$$

(c) $|\partial_x^\alpha B(t,x)| \le C_\alpha$ のとき，

$$F[\gamma] = e^{\int_{T'}^{T''} B(t,\gamma(t))dt} \in \mathcal{F}.$$

(d) ${}^t(\partial_x Z) = (\partial_x Z)$ となるベクトル値関数 $Z(t,x): \mathbf{R}\times\mathbf{R}^d \to \mathbf{C}^d$ は任意の多重指数 α に対し，$\partial_x^\alpha Z(t,x)$ と $\partial_x^\alpha \partial_t Z(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し，
$|\partial_x^\alpha Z(t,x)| + |\partial_x^\alpha \partial_t Z(t,x)| \le C_\alpha(1+|x|)^m$
とする．このとき，経路に沿った線積分

$$F[\gamma] = \int_{T'}^{T''} Z(t,\gamma(t))\cdot d\gamma(t) \in \mathcal{F}.$$

次に汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ の代数を述べる．

定理 1（$\mathcal{F}$ の代数） 任意の汎関数 $F[\gamma], G[\gamma] \in \mathcal{F}$ と任意の折れ線経路 $\eta: [0,T] \to \mathbf{R}^d$ と任意の $d\times d$ 型実行列 P に対して，以下が成立する．
(a) $F[\gamma]+G[\gamma] \in \mathcal{F}$, $F[\gamma]G[\gamma] \in \mathcal{F}$.
(b) $F[\gamma+\eta] \in \mathcal{F}$, $F[P\gamma] \in \mathcal{F}$.
(c) $D_\eta F[\gamma] \in \mathcal{F}$.
ただし，折れ線経路 $\gamma: [0,T] \to \mathbf{R}^d$ と $\eta: [0,T] \to \mathbf{R}^d$ に対し，汎関数微分 $D_\eta F[\gamma]$ を $D_\eta F[\gamma] = \left.\dfrac{d}{d\theta}F[\gamma+\theta\eta]\right|_{\theta=0}$ とする．

注 1 言い換えると，$\mathcal{F}$ は和や積，経路の平行移動や線形変換，さらに汎関数微分の演算に関して閉じている．特に何回でも汎関数微分できる．

定理 1 を例 1 に適用すれば，$\mathcal{F}$ に属する多くの汎関数 $F[\gamma]$ を創ることができるので，汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ の定義は，後の 5 節で述べる．

さて時間分割近似法による経路積分 (2) の定義を述べよう：区間 $[0,T]$ の任意の分割を

$$\Delta_{T,0}: T = T_{J+1} > T_J > \cdots > T_1 > T_0 = 0$$

とする．$t_j = T_j - T_{j-1}$ とし，$|\Delta_{T,0}| = \max_{1\le j\le J+1} t_j$ とする．$x_{J+1} = x$ とおき，$x_j \in \mathbf{R}^d$, $j = 1,2,\ldots,J$ とする．任意の $j = 1,2,\ldots,J,J+1$ に対し (T_j, x_j) と (T_{j-1}, x_{j-1}) を線分で結ぶ**折れ線経路**を

$$\gamma_{\Delta_{T,0}} = \gamma_{\Delta_{T,0}}(t, x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0) \qquad (3)$$

とする (図 2)．汎関数 $S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$ と $F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$ は x_{J+1}, $x_J, \ldots, x_1, x_0$ の関数となるので

$$S[\gamma_{\Delta_{T,0}}] = \sum_{j=1}^{J+1} \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2t_j} - \int_{T_{j-1}}^{T_j} V\left(t, \frac{(t-T_{j-1})x_j + (T_j - t)x_{j-1}}{T_j - T_{j-1}}\right)dt$$

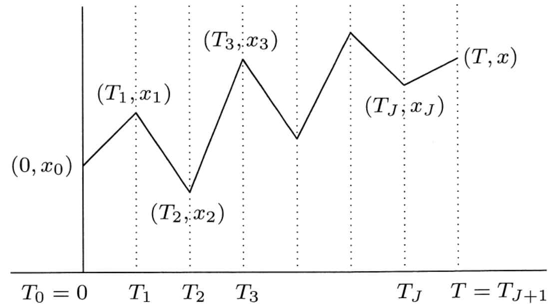


図 2 折れ線経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$.

$$= S_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0),$$

$$F[\gamma_{\Delta_{T,0}}] = F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0)$$

とする．Feynman[3)] の (1) の定義に従って，一般的な汎関数 $F[\gamma]$ を振幅とする経路積分 (2) を

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma] = \lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0} \prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2} \times \int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]\prod_{j=1}^{J} dx_j \qquad (4)$$

で定義する．

定理 2（経路積分の存在） T が十分小さいとき，任意の汎関数 $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ に対して，(4) の右辺は，終点 x と始点 x_0 に関して $\mathbf{R}^{2d}$ 上で広義一様収束する．つまり，(4) は well-defined である．

注 2 (4) の多重積分を分割 $\Delta_{T,0}$ をもつ折れ線経路（図 2）に関する和と解釈し，$|\Delta_{T,0}| \to 0$ とした極限をすべての経路に関する和と解釈する．

注 3 (4) を数学的に扱う場合，2 つのハードルがある．まず $F[\gamma] = 1$ の場合でさえ (4) の右辺の x_j に関する各積分は絶対収束しない．さらに $|\Delta_{T,0}| \to 0$ のとき (4) の右辺の積分の個数 J は $J \to \infty$ となる．Feynman[3)] は関数の形

$$\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0)} \prod_{j=1}^{J} dx_j$$

を用いて説明した．Nelson[16)] は関数 $S_{\Delta_{T,0}}$ の近似を用いて，x_j に関する絶対収束しない各積分をそれぞれ作用素として Trotter 公式で扱った．

$$\int_{\mathbf{R}^d}\cdots\int_{\mathbf{R}^d} e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{J+1}\frac{(x_j-x_{j-1})^2}{2T/(J+1)} - \frac{V(x_{j-1})T}{J+1}} v(x_0)\prod_{j=0}^{J} dx_j.$$

しかし近似は元の汎関数 $S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$ と異なる．これに対し我々は (4) の多重積分を**振動積分**[12, §1.6)5, §3.2)] として直接扱い，経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$ を保持する．

注 4　T の小ささは $V(t,x)$ に依存する．例えば $d=1$, $V(t,x)=x^2/2$（調和振動子），$F[\gamma]=1$ のとき，(4) は (1) の基本解

$$K(T,x,x_0)=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar\sin T}\right)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{(x^2+x_0^2)\cos T-2x\cdot x_0}{2\sin T}}$$

となるので，T が大きい（例えば $T=\pi/2$）場合は成立しない．しかし，作用素の意味での収束と解釈すれば，T が大きい場合も成立する．

3. 経路積分の性質

定理 1,2 を仮定して経路積分の性質を説明する．

定理 3（微分積分学の基本定理）　T は十分小さいとする．m を非負整数，$0\le T'\le T''\le T$ とし，関数 $f(t,x):\mathbf{R}\times\mathbf{R}^d\to\mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対し，$\partial_x^\alpha f(t,x)$ と $\partial_x^\alpha\partial_t f(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し，

$$|\partial_x^\alpha f(t,x)|+|\partial_x^\alpha\partial_t f(t,x)|\le C_\alpha(1+|x|)^m$$

とする．このとき，

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}\Big(f(T'',\gamma(T''))-f(T',\gamma(T'))\Big)\mathcal{D}[\gamma]$$
$$=\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}\Big(\int_{T'}^{T''}(\partial_x f)(t,\gamma(t))\cdot d\gamma(t)$$
$$+\int_{T'}^{T''}(\partial_t f)(t,\gamma(t))dt\Big)\mathcal{D}[\gamma].$$

注 5　言い換えると，経路積分において微分積分学の基本定理が成立する．Brown 運動を用いた確率解析において，Itô 積分は左端点を用いて定義され，Stratonovich 積分は中点を用いて定義される．また Feynman は中点規則を用いている．これに対し，我々の線積分 $\int_{T'}^{T''}(\partial_x f)(t,\gamma(t))\cdot d\gamma(t)$ は $\gamma=\gamma_{\Delta_{T,0}}$ のとき，経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$ に沿った線積分そのものである（図 3）．

（定理 3 の証明）　例 1(a), (b), (d) と定理 1(a) より，

$$F[\gamma]=f(T'',\gamma(T''))-f(T',\gamma(T')),$$
$$G[\gamma]=\int_{T'}^{T''}(\partial_x f)(t,\gamma(t))\cdot d\gamma(t)$$
$$+\int_{T'}^{T''}(\partial_t f)(t,\gamma(t))dt$$

とおくと $F[\gamma]$, $G[\gamma]\in\mathcal{F}$．また任意の折れ線経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$ に対し $F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]=G[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$．定理 2 より

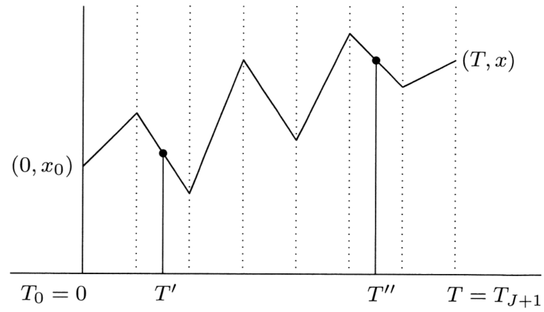


図 3　経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$ に沿って積分する．

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]$$
$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$
$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}}e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]\prod_{j=1}^{J}dx_j$$
$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$
$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}}e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}G[\gamma_{\Delta_{T,0}}]\prod_{j=1}^{J}dx_j$$
$$=\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}G[\gamma]\mathcal{D}[\gamma].$$

□

定理 4（Riemann 積分との順序交換）　T は十分小さいとする．m は非負整数，$0\le T'\le T''\le T$ とし，関数 $B(t,x):\mathbf{R}\times\mathbf{R}^d\to\mathbf{C}$ は任意の多重指数 α に対し，$\partial_x^\alpha B(t,x)$ が連続で，正の定数 C_α が存在し $|\partial_x^\alpha B(t,x)|\le C_\alpha(1+|x|)^m$ とする．このとき，

$$\int_{T'}^{T''}\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}B(t,\gamma(t))\mathcal{D}[\gamma]dt$$
$$=\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}\int_{T'}^{T''}B(t,\gamma(t))dt\mathcal{D}[\gamma].$$

注 6　左辺は経路積分した後，Riemann 積分し，右辺は Riemann 積分した後，経路積分する．

注 7　Nelson[16)] は時刻 t での位置を端点 x_j または x_{j-1} で近似し，(4) の各積分をそれぞれ作用素として扱った．一方，我々は時刻 t での位置

$$\gamma_{\Delta_{T,0}}(t)=\frac{t-T_{j-1}}{T_j-T_{j-1}}x_j+\frac{T_j-t}{T_j-T_{j-1}}x_{j-1}$$

$(T_{j-1}\le t\le T_j)$ を多重（振動）積分 (4) の中で保持する（図 4）．このため，折れ線経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}(t)$ の時刻 t に関する連続性を用いることができる．

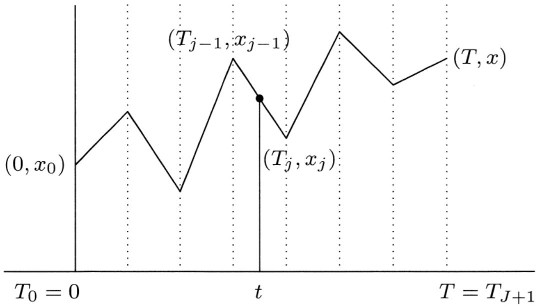


図 4　$\gamma_{\Delta_{T,0}}(t)$ は $[0,T]$ 上連続である．

（定理 4 の証明）　$B(t, \gamma_{\Delta_{T,0}}(t))$ は，x_j に関する導関数も含めて，t に関して連続である．ゆえに，任意の分割 $\Delta_{T,0}$ に対して，多重（振動）積分

$$\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}B(t,\gamma_{\Delta_{T,0}}(t))\prod_{j=1}^{J}dx_j$$

も t に関して連続な関数となる．また，

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}B(t,\gamma(t))\mathcal{D}[\gamma]$$

$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}B(t,\gamma_{\Delta_{T,0}}(t))\prod_{j=1}^{J}dx_j$$

は t に関して一様収束する．ゆえに，極限関数

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}B(t,\gamma(t))\mathcal{D}[\gamma]$$

も t に関して連続で Riemann 積分可能となる．また一様収束なので，極限 $\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}$ は積分 $\int_{T'}^{T''}\sim dt$ と順序交換できて

$$\int_{T'}^{T''}\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}B(t,\gamma(t))\mathcal{D}[\gamma]dt$$

$$=\int_{T'}^{T''}\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}B(t,\gamma_{\Delta_{T,0}}(t))\prod_{j=1}^{J}dx_j dt$$

$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\int_{T'}^{T''}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}B(t,\gamma_{\Delta_{T,0}}(t))\prod_{j=1}^{J}dx_j dt.$$

多重（振動）積分と積分 $\int_{T'}^{T''}\sim dt$ を順序交換して

$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}]}\int_{T'}^{T''}B(t,\gamma_{\Delta_{T,0}}(t))dt\prod_{j=1}^{J}dx_j$$

$$=\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}\int_{T'}^{T''}B(t,\gamma(t))dt\mathcal{D}[\gamma].\qquad\square$$

注 8（摂動展開）　ある種の極限との順序交換も成立する．例えば $|\partial_x^\alpha B(t,x)|\le C_\alpha$ のとき，

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]+\frac{i}{\hbar}\int_{T'}^{T''}B(\tau,\gamma(\tau))d\tau}\mathcal{D}[\gamma]$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{T'}^{T''}d\tau_n\int_{T'}^{\tau_n}d\tau_{n-1}\cdots\int_{T'}^{\tau_2}d\tau_1$$

$$\times\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}B(\tau_n,\gamma(\tau_n))\cdots B(\tau_1,\gamma(\tau_1))\mathcal{D}[\gamma].$$

定理 5（平行移動）　T が十分小さいとき，任意の汎関数 $F[\gamma]\in\mathcal{F}$ と任意の折れ線経路 $\eta:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ に対して，

$$\int_{\gamma(0)=x_0,\gamma(T)=x} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma+\eta]}F[\gamma+\eta]\mathcal{D}[\gamma]$$

$$=\int_{\gamma(0)=x_0+\eta(0),\gamma(T)=x+\eta(T)} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma].$$

注 9　左辺はすべての経路を平行移動した後，すべての経路に関して和を取り，右辺は始点と終点を平行移動した後，すべての経路に関して和を取る．

（定理 5 の証明）　$\gamma_{\Delta_{T,0}}(T_j)=x_j$ を用いて

$$\int_{\gamma(0)=x_0,\gamma(T)=x} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma+\eta]}F[\gamma+\eta]\mathcal{D}[\gamma]$$

$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma_{\Delta_{T,0}}+\eta]}F[\gamma_{\Delta_{T,0}}+\eta]\prod_{j=1}^{J}dx_j$$

と書ける．分割 $\Delta_{T,0}$ が折れ線経路 η の折れる時刻をすべて含むように選ぶ（図 5）．$\eta(T_j)=y_j$，$j=0,1,\ldots,J,J+1$ とする．$\gamma_{\Delta_{T,0}}+\eta$ は (T_j, x_j+y_j) と $(T_{j-1}, x_{j-1}+y_{j-1})$ を線分で結ぶ折れ線経路となるので，

$$=\lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2}$$

$$\times\int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}+y_{J+1},x_J+y_J,\ldots,x_1+y_1,x_0+y_0)}$$

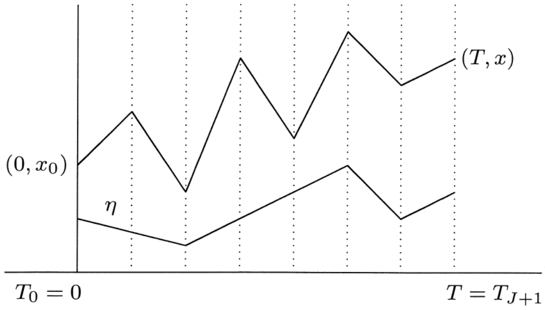


図5　折れ線経路 $\gamma_{\Delta_{T,0}}$ と η.

$$\times F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}+y_{J+1}, x_J+y_J, \dots, x_1+y_1, x_0+y_0)\prod_{j=1}^{J} dx_j\,.$$

変数変換 $x_j+y_j \to x_j$, $j=1,2,\dots,J$ より

$$= \lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\prod_{j=1}^{J+1}\left(\frac{1}{2\pi i\hbar t_j}\right)^{d/2} \times \int_{\mathbf{R}^{dJ}} e^{\frac{i}{\hbar}S_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}+y_{J+1},x_J,\dots,x_1,x_0+y_0)} \times F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}+y_{J+1},x_J,\dots,x_1,x_0+y_0) \times \prod_{j=1}^{J} dx_j$$

$$= \int_{\gamma(0)=x_0+\eta(0),\gamma(T)=x+\eta(T)} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]. \qquad \square$$

定理 6（直交変換）T が十分小さいとき，任意の汎関数 $F[\gamma]\in\mathcal{F}$ と任意の $d\times d$ 型直交行列 Q に対して，

$$\int_{\gamma(0)=x_0,\gamma(T)=x} e^{\frac{i}{\hbar}S[Q\gamma]}F[Q\gamma]\mathcal{D}[\gamma] = \int_{\gamma(0)=Qx_0,\gamma(T)=Qx} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

注 10　左辺はすべての経路を直交変換した後，すべての経路に関して和を取り，右辺は始点と終点を直交変換した後，すべての経路に関して和を取る．

定理 7（汎関数微分に関する部分積分）T が十分小さいとき，任意の汎関数 $F[\gamma]\in\mathcal{F}$ と $\eta(0)=\eta(T)=0$ となる任意の折れ線経路 $\eta:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ に対して，

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}D_\eta F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma] = -\frac{i}{\hbar}\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}D_\eta S[\gamma]F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]\,.$$

注 11　左辺は $F[\gamma]$ を汎関数微分し，右辺は $e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}$ を汎関数微分した後，(-1) をかける．

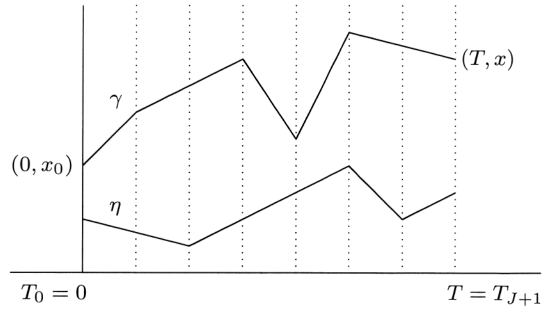


図6　折れ線経路 γ と η.

定理 6,7 の証明は省略し，汎関数微分だけ説明する．

注 12（汎関数微分）　分割 $\Delta_{T,0}$ が折れ線経路 γ または η の折れる時刻をすべて含むように選ぶ（図 6）．$\gamma(T_j)=x_j$, $\eta(T_j)=y_j$, $j=0,1,\dots,J,J+1$ とする．このとき任意の $\theta\in\mathbf{R}$ に対し $\gamma+\theta\eta$ は $(T_j, x_j+\theta y_j)$ と $(T_{j-1}, x_{j-1}+\theta y_{j-1})$ を線分で結ぶ折れ線経路となる．よって $F[\gamma+\theta\eta]$ は

$$F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}+\theta y_{J+1}, x_J+\theta y_J, \dots, x_0+\theta y_0)$$

と書け，$D_\eta F[\gamma]$ は関数の有限和で書ける．

$$D_\eta F[\gamma] = \frac{d}{d\theta}F[\gamma+\theta\eta]\Big|_{\theta=0} = \sum_{j=0}^{J+1}(\partial_{x_j}F_{\Delta_{T,0}})(x_{J+1},x_J,\dots,x_1,x_0)\cdot y_j\,.$$

汎関数微分の方向を折れ線経路に限定すると，汎関数微分も扱い易い点に注意してほしい．

さて**古典経路** $\gamma^c:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ を Euler 方程式

$$\frac{d^2\gamma^c}{dt^2}(t)+(\partial_x V)(t,\gamma^c(t))=0\,,\ 0\le t\le T\,,$$
$$\gamma^c(0)=x_0\,,\quad \gamma^c(T)=x$$

で定義する（図 7）．

$$(\partial_{(x_J,\dots,x_1)}S_{\Delta_{T,0}})(x_{J+1},x_J^\dagger,\dots,x_1^\dagger,x_0)=0\,.$$

で定義される関数 $S_{\Delta_{T,0}}$ の停留点 $(x_J^\dagger,\dots,x_1^\dagger)$ を $S_{\Delta_{T,0}}$ の Hesse 行列式に代入して，

$$D(T,x_{J+1},x_0) = \lim_{|\Delta_{T,0}|\to 0}\left(\frac{\prod_{j=1}^{J+1}t_j}{T_{J+1}}\right)^d \times \det(\partial^2_{(x_J,\dots,x_1)}S_{\Delta_{T,0}})(x_{J+1},x_J^\dagger,\dots,x_1^\dagger,x_0).$$

とすると $D(T,x,x_0)$ は Van Vleck–Morette 行列式になる．$\hbar\to 0$ としたときの**準古典近似**の余りの項の評価は以下のようになる．

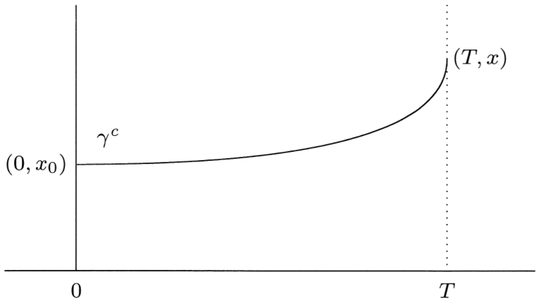


図7　古典経路 γ^c.

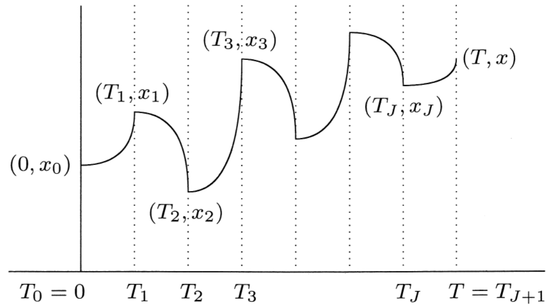


図8　$\gamma_{\Delta_{T,0}}$ が区分的古典経路の場合.

定理 8（準古典近似）T が十分小さいとする．このとき，任意の汎関数 $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ に対して，

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma] = \left(\frac{1}{2\pi i\hbar T}\right)^{d/2} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma^c]}$$

$$\times\ D(T,x,x_0)^{-1/2}\Big(F[\gamma^c] + \hbar\Upsilon(\hbar,T,x,x_0)\Big)$$

と書け，余りの項 $\Upsilon(\hbar,T,x,x_0)$ は任意の多重指数 α, β に対し，正の定数 $C_{\alpha,\beta}$ が存在し，

$$|\partial_x^\alpha \partial_{x_0}^\beta \Upsilon(\hbar,T,x,x_0)| \le C_{\alpha,\beta}(1+|x|+|x_0|)^m.$$

注 13　荒く言うと，すべての経路に関して和を取った結果，主要部は一本の古典経路 γ^c となる．

4. 定理 1, 2, 8 の証明

藤原[5)]は (3) で**折れ線経路**の代わりに，(T_j, x_j) と (T_{j-1}, x_{j-1}) を古典経路で結ぶ**区分的古典経路**（図 8）を用いて，定理 2,8 の $F[\gamma] = 1$ **の場合**を証明した．これを証明の出発点とする．

折れ線経路を用いて時間分割近似法 (4) の収束を証明するには，収束するように関数（汎関数）

$$F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0) = F[\gamma_{\Delta_{T,0}}]$$

に条件を加えていき，その条件で汎関数のクラス $\mathcal{F}$ を定義すれば良い．他のことは考えない．そうすれば，$\mathcal{F}$ は集合として大きくなり，運が良ければ例を含む．特に藤原[5)]の結果があるので，少なくとも 1 つの例 $F[\gamma] = 1$ を含むであろう．

こうして発見した $\mathcal{F}$ の仮定 3 だけを述べるのは唐突なので，途中で発見した**区分的古典経路**の仮定も述べる：仮定 2 を満たす汎関数 $F[\gamma]$ のクラスは例 1 を含み，定理 1(a), 2, 3, 4, 8 が成立する．

仮定 2（$\gamma_{\Delta_{T,0}}$ **が区分的古典経路の場合**）m を非負整数，$u_j \ge 0$, $\sum_{j=1}^{J+1} u_j = U < \infty$ とする．任意の非負整数 M に対し，正の定数 A_M, X_M が存在して，任意の分割 $\Delta_{T,0}$，任意の多重指数 $|\alpha_j| \le M$, $j = 0, 1, \ldots, J+1$ と任意の $1 \le k \le J$ に対し，

$$\left|\left(\prod_{j=0}^{J+1}\partial_{x_j}^{\alpha_j}\right) F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0)\right|$$

$$\le A_M (X_M)^{J+2}\left(1+\sum_{j=0}^{J+1}|x_j|\right)^m,$$

$$\left|\left(\prod_{j=0}^{J+1}\partial_{x_j}^{\alpha_j}\right) \partial_{x_k} F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_1, x_0)\right|$$

$$\le A_M (X_M)^{J+2}(u_{k+1}+u_k)\left(1+\sum_{j=0}^{J+1}|x_j|\right)^m.$$

5. 汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ の定義

仮定 3 を述べるため高階の汎関数微分を用いる．

定義 1（高階の汎関数微分）任意の分割 $\Delta_{T,0}$ に対し，$F_{\Delta_{T,0}}(x_{J+1}, x_J, \ldots, x_0) \in C^\infty(\mathbf{R}^{d(J+2)})$ とする．折れ線経路 $\gamma : [0,T] \to \mathbf{R}^d$ と $\eta_l : [0,T] \to \mathbf{R}^d$, $l = 1, 2, \ldots, L$ に対して，高階の汎関数微分 $(\prod_{l=1}^L D_{\eta_l})F[\gamma]$ を以下で定義する．

$$\left(\prod_{l=1}^{L} D_{\eta_l}\right) F[\gamma]$$

$$= \left(\prod_{l=1}^{L}\frac{\partial}{\partial\theta_l}\right) F\left[\gamma + \sum_{l=1}^{L}\theta_l\eta_l\right]\Bigg|_{\theta_1=\cdots=\theta_L=0}.$$

さて汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$ の定義を述べよう．

定義 2（汎関数 $F[\gamma]$ のクラス $\mathcal{F}$）すべての折れ線経路を定義域に含む汎関数 $F[\gamma]$ が仮定 3 を満たすとき $F[\gamma] \in \mathcal{F}$ とする．

仮定 3　m を非負整数，$\rho(t)$ を $[0,T]$ 上の有界変動関数とする．任意の非負整数 M に対し，正の定数 A_M, X_M が存在し，

$$\left|\left(\prod_{j=0}^{J+1}\prod_{l=1}^{L_j} D_{\eta_{j,l}}\right) F[\gamma]\right|$$

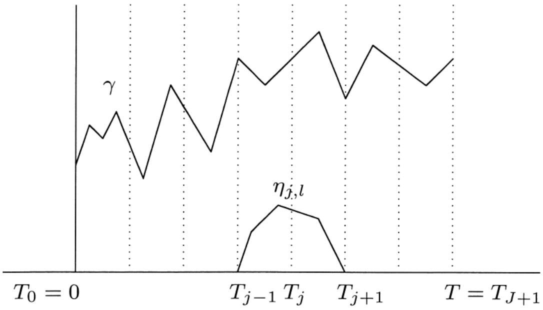


図 9　折れ線経路 γ と $\eta_{j,l}$.

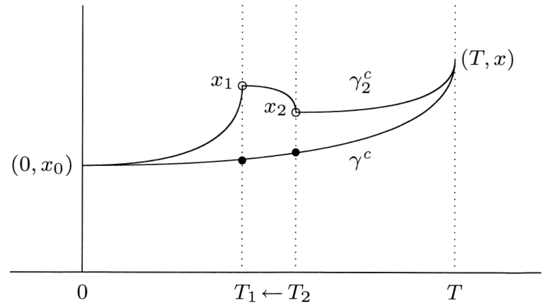


図 10　区分的古典経路 γ_2^c と古典経路 γ^c.

$$\le A_M(X_M)^{J+2}(1+||\gamma||)^m \prod_{j=0}^{J+1}\prod_{l=1}^{L_j}||\eta_{j,l}||,$$

$$\left|\left(\prod_{j=0}^{J+1}\prod_{l=1}^{L_j} D_{\eta_{j,l}}\right) D_\eta F[\gamma]\right|$$

$$\le A_M(X_M)^{J+2}(1+||\gamma||)^m \prod_{j=0}^{J+1}\prod_{l=1}^{L_j}||\eta_{j,l}||$$

$$\times \int_0^T |\eta(t)|d|\rho|(t)$$

が，任意の折れ線経路 $\gamma:[0,T]\to\mathbf{R}^d$，任意の分割 $\varDelta_{T,0}$，区間 $[T_{j-1},T_{j+1}]$ に台をもつ任意の折れ線経路 $\eta_{j,l}:[0,T]\to\mathbf{R}^d$, $j=0,1,\dots,J,J+1$, $l=1,2,\dots,L_j$, $L_j=0,1,\dots,M$ と任意の折れ線経路 $\eta:[0,T]\to\mathbf{R}^d$ に対して成立する（図 9）．ただし，$||\gamma|| = \max_{0\le t\le T}|\gamma(t)|$, $|\rho|(t)$ は $\rho(t)$ の全変動とする．

6. 準古典近似の第 2 項

藤原[7]は**区分的古典経路**を用いて，$\hbar\to 0$ としたときの**準古典近似の第 2 項**を積分の形で表した：

γ_2^c を $(0,x_0)$, (T_1,x_1), (T_2,x_2), (T,x) を古典経路で結ぶ区分的古典経路とし

$$a(T_1)=a(T_1,x,x_0)$$

$$=\lim_{T_2\downarrow T_1}\triangle_{x_1}\left(D(T_1,x_1,x_0)^{-\frac{1}{2}}F[\gamma_2^c]\right)\Bigg|_{x_1=\gamma^c(T_1)}^{x_2=\gamma^c(T_2)}$$

とする（図 10）．$a(t)$ が連続ならば,

$$\int e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma]}F[\gamma]\mathcal{D}[\gamma]$$

$$=\left(\frac{1}{2\pi i\hbar T}\right)^{d/2} e^{\frac{i}{\hbar}S[\gamma^c]}D(T,x,x_0)^{-1/2}$$

$$\times\left(F[\gamma^c]+\hbar\frac{i}{2}\int_0^T D(t,\gamma^c(t),x_0)^{1/2}a(t)dt\right.$$

$$\left.+\hbar^2\Upsilon_2(\hbar,T,x,x_0)\right)$$

と書け，余りの項 $\Upsilon_2(\hbar,T,x,x_0)$ は任意の多重指数 α, β に対し，正の定数 $C_{\alpha,\beta}$ が存在し，

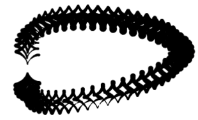
$$|\partial_x^\alpha\partial_{x_0}^\beta\Upsilon_2(\hbar,T,x,x_0)|\le C_{\alpha,\beta}(1+|x|+|x_0|)^m.$$

参考文献

1) S. Albeverio, Høegh-Krohn and S. Mazzucchi, *Mathematical theory of Feynman path integrals*, Lect. Notes in Math., 523, Springer, 2nd ed., 2008.
2) R.H. Cameron, *J. Math. and Phys.* **39** (1960), 126–140.
3) R.P. Feynman, *Rev. Modern Physics* **20** (1948), 367–387.
4) R.P. ファインマン，A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，『量子力学と経路積分』，みすず書房，1995.
5) 藤原大輔，『ファインマン経路積分の数学的方法—時間分割近似法』，シュプリンガー・ジャパン，1999.
6) D. Fujiwara and N. Kumano-go, *Bull. Sci. Math.* **129** (2005), 57–79.
7) D. Fujiwara and N. Kumano-go, *J. Math. Soc. Japan* **58**, No.3 (2006), 837–867.
8) L. Streit and T. Hida（飛田武幸），*Stochastic Process. Appl.* **16** (1983), pp.55–69.
9) 一瀬孝，「Path Integral 入門」，『数理物理への誘い』（江沢洋編），遊星社 (1986);「経路積分—解析学の立場から」，『数学の未解決問題』，サイエンス社 (2003).
10) 池田信行，「確率解析と経路積分」，『数学の未解決問題』，サイエンス社 (2003).
11) K. Itô, *Proc. 5th Berkeley Sympos. Math. Statist. and Prob.*, vol.2, part 1, 145–161, Univ. California press, Berkeley, 1967.
12) 熊ノ郷準，『擬微分作用素』，岩波書店，1974.
13) N. Kumano-go, *Bull. Sci. Math.* **128** (2004), 197–251.
14) N. Kumano-go and D. Fujiwara, *RIMS Kôkyûroku Bessatsu*, **B5** (2008), 225–247.
15) 中村徹，『超準解析と物理学』，日本評論社，1998.
16) E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5** (1964), 332–343.
17) L.S. シュルマン著，高塚和夫訳，『ファインマン経路積分』，講談社，1995.

（くまのごう・なおと，工学院大学基礎・教養教育部門）

量子可積分系と代数構造



白石　潤一

1. イントロダクション

本稿では，ある量子力学の可積分系の問題とその背後に存在する代数的構造について述べる．出発点となる題材は（A 型の）Macdonald 多項式の理論[8]であるが，そこから導き出される代数的構造（Hopf 代数の構造[5,9]）は我々の視界を格段に広げる．Macdonald 多項式に付随した可積分系を頂点作用素を用いて記述し，そこからどのようにその代数構造が抽出できるか考える．

Aganagic–Klemm–Mariño–Vafa のトポロジカルバーテックス[2]はトーリック Calabi–Yau 多様体の不変量や 4 次元のゲージ場の理論の分配関数である Nekrasov 分配関数[10]に関する深い考察から生まれた．Alday–Gaiotto–Tachikawa によって発見された対応によると，Nekrasov 分配関数と 2 次元の共形場の理論の相関関数がパラメータの読み替えの下で厳密に一致するという[4]．このような興味深い現象は，我々の Hopf 代数の立場からどのように説明できるであろうか？ 最後の節では，紙数の許す限り現在の理解の一端について触れたい．

2. Fock 空間

2.1 Heisenberg 代数

まず，最も簡単な設定で量子力学の基本的な考え方を思い出そう．変数 x の多項式全体の成す空間を考える．この空間の上では，x を掛ける演算，x についての微分演算は共に線形作用素であり，交換関係

$$\left[\frac{d}{dx}, x\right] f(x) = 1 \cdot f(x), \quad \text{即ち} \quad \left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1,$$

を満たす．このような交換関係で定められる Lie 代数を Heisenberg 代数と呼ぶ．

Hamiltonian を $\frac{1}{2}(x\frac{d}{dx} + \frac{d}{dx}x) = x\frac{d}{dx} + \frac{1}{2}$ とおけば，単項式 x^n $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ は固有値 $n + \frac{1}{2}$ の固有状態となる．このような代数的な枠組み（いわゆる生成消滅演算子の成す代数）が量子化された調和振動子の離散的かつ等間隔なスペクトルを説明するのであった．

2.2 Fock 空間

$1+1$ 次元（空間 1 次元，時間 1 次元）の質量のない自由ボソン場の量子化を行えば，その右（ないし左）に進む波が表す部分は可算無限個の生成消滅演算子の集まりによって表現される．そこで，我々は加算無限個の変数 $p_1, p_2, p_3, \ldots$ の多項式全体の成す空間 $\mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$ を考える．この空間の上には，掛け算作用素と偏微分作用素が作用し，交換関係

$$\left[\frac{\partial}{\partial p_m}, p_n\right] = \delta_{m,n}$$

を満たしている．

q, t を 2 つのパラメータとする．$n > 0$ に対して

$$a_n = n\frac{1-q^n}{1-t^n}\frac{\partial}{\partial p_n}, \quad a_{-n} = p_n,$$

そして，$a_0 = \mathrm{id}$ と定めると，交換関係

$$[a_m, a_n] = m\frac{1-q^{|m|}}{1-t^{|m|}}\delta_{m+n,0}a_0,$$

が成り立ち，無限次元の Heisenberg Lie 代数を得る．$\mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$ の元 1 を $|0\rangle$（真空ベクトル）と書くと，

$$|0\rangle = 1, \quad a_n|0\rangle = 0 \quad (n > 0).$$

定義 1. Fock 空間 $\mathcal{F}$ を

$$\mathcal{F} = \Big(|0\rangle, a_{-1}|0\rangle, a_{-2}|0\rangle, a_{-1}^2|0\rangle, \cdots \text{ で張られるベクトル空間}\Big) = \mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$$

と定める．

2.3 次数による分解

a_{-n} の次数を n とすることで，$\mathcal{F}$ は自然に次数による直和分解を持つ．斉次 n 次の部分空間を $\mathcal{F}_n$ と書けば

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n\geq 0}\mathcal{F}_n.$$

非負の整数の非増加列 $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots)$（つまり $\lambda_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ で $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq 0$）で成分の総和が有限（$\sum_i \lambda_i < \infty$）なものを**分割**と呼ぶ．成分の総和を $|\lambda| = \sum_i \lambda_i$ と書く．

斉次 n 次の部分空間 $\mathcal{F}_n$ は $(a_{-\lambda}|0\rangle)_{|\lambda|=n}$ を基底に持つ．ここに $a_{-\lambda} = a_{-\lambda_1}a_{-\lambda_2}a_{-\lambda_3}\cdots$ と略記した．

命題 1. 次元公式：

$$\sum_{n\geq 0}\dim(\mathcal{F}_n)y^n = \frac{1}{(1-y)(1-y^2)(1-y^3)(1-y^4)\cdots} = 1+y+2y^2+3y^3+5y^4+7y^5+11y^6+\cdots.$$

2.4 Fock 空間の双対

真空ベクトルの双対ベクトル $\langle 0|$ は，条件

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \langle 0|a_{-n} = 0 \quad (n > 0)$$

を満たすとする．

定義 2. Fock 空間 $\mathcal{F}$ の双対 $\mathcal{F}^*$ を

$$\mathcal{F}^* = \Big(\langle 0|, \langle 0|a_1, \langle 0|a_2, \langle 0|a_1^2, \cdots \text{ で張られるベクトル空間}\Big),$$

と定める．

2.5 Macdonald の内積とペアリング

多項式の空間 $\mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$ の上に

$$\langle p_\lambda, p_\mu\rangle_{q,t} = \delta_{\lambda,\mu}z_\lambda\prod_{i=1}^{\ell(\lambda)}\frac{1-q^{\lambda_i}}{1-t^{\lambda_i}},$$

$$z_\lambda = \prod_{i\geq 1} i^{m_i}\cdot m_i!$$

で内積を定める．ここに，m_i は分割 λ において値が i であるような成分の数である．例えば，$\lambda = (5,4,4,3,3,3,1)$ のとき，$m_1 = 1$, $m_2 = 0$, $m_3 = 3$, $m_4 = 2$, $m_5 = 1$, $m_6 = 0$.

命題 2. $\mathcal{F}$ と $\mathcal{F}^*$ のペアリングと $\mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$ の内積は同じである，即ち，

$$\langle 0|a_\lambda a_{-\mu}|0\rangle = \langle p_\lambda, p_\mu\rangle_{q,t}.$$

3. 頂点作用素と量子可積分系

3.1 $\eta(z)$

頂点作用素とは，Heisenberg 代数の元の指数関数を指すものとする．まず頂点作用素 $\eta(z)$ を

$$\eta(z) = \exp\left(\sum_{n>0}\frac{1-t^{-n}}{n}a_{-n}z^n\right) \times \exp\left(-\sum_{n>0}\frac{1-t^n}{n}a_n z^{-n}\right)$$

と定める．$\eta(z)$ の $f(p) \in \mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots] = \mathcal{F}$ への作用の様子を見てみよう．まず

$$\exp\left(-\sum_{n>0}\frac{1-t^n}{n}a_n z^{-n}\right)f(p_1, p_2, \ldots, p_n, \ldots) = f(p_1-(1-q)z^{-1}, p_2-(1-q^2)z^{-2}, \ldots, p_n-(1-q^n)z^{-n}, \ldots),$$

となる．$f(p)$ は多項式であるから，右辺は z の

Laurent 多項式であり，z の各冪の係数は意味をもつ（$\mathbb{Q}[p_1, p_2, p_3, \ldots]$ の元として定まる）．従って，頂点作用素 $\eta(z)$ の Fourier 成分 η_n を $\eta(z) = \sum_n \eta_n z^{-n}$ で定めると，η_n は $\mathcal{F}$ の上の well defined な線形作用素である．

3.2 正規順序積の記号

我々は幾つかの頂点作用素の積を扱いその交換関係等を調べたいのだが，そのとき**正規順序積**の記号 $:\cdots:$ を導入するのが便利である．記号 $:\cdots:$ の中に書かれた生成演算子は左へ，消滅演算子は右へ持っていく．例えば $:a_1 a_{-1}: = a_{-1}a_1$，また，

$$
\begin{aligned}
&:\eta(z)\eta(w): \\
&= e^{\sum_{n>0}\frac{1-t^{-n}}{n}a_{-n}z^n} e^{\sum_{n>0}\frac{1-t^{-n}}{n}a_{-n}w^n} \\
&\quad \times e^{-\sum_{n>0}\frac{1-t^{n}}{n}a_{n}z^{-n}} e^{-\sum_{n>0}\frac{1-t^{n}}{n}a_{n}w^{-n}}.
\end{aligned}
$$

3.3 関係式

$\eta(z)$ の満たす関係式を求めよう．等式 $e^{\alpha\frac{d}{dx}}e^{\beta x} = e^{\alpha\beta}e^{\beta x}e^{\alpha\frac{d}{dx}}$ を用いれば（領域 $|z| \gg |w|$ において）

$$
\begin{aligned}
&\eta(z)\eta(w) \\
&= \frac{(1-w/z)(1-qt^{-1}w/z)}{(1-qw/z)(1-t^{-1}w/z)} :\eta(z)\eta(w):
\end{aligned}
$$

という関係式を得る．従って

$$
\begin{aligned}
&\frac{(1-qw/z)(1-t^{-1}w/z)}{(1-w/z)(1-qt^{-1}w/z)}\eta(z)\eta(w) \\
&= \frac{(1-qz/w)(1-t^{-1}z/w)}{(1-z/w)(1-qt^{-1}z/w)}\eta(w)\eta(z)
\end{aligned}
$$

が得られる．これを Fourier 成分を用いて書けば

$$
[\eta_m, \eta_n] = \sum_{l>0} f_l\big(-\eta_{m-l}\eta_{n+l} + \eta_{n-l}\eta_{m+l}\big),
$$

$$
f_l = \frac{(1-q)(1-t^{-1})(1-q^l t^{-l})}{(1-qt^{-1})}.
$$

3.4 可積分性

互いに交換する作用素（Hamiltonian）が十分にたくさん存在する場合，我々の量子系は**可積分**であると言うことにしよう．

$I_1 = \eta_0$ とおく．実は，$I_1 = \eta_0$ は次のような η_n の 2 次式と交換する：

$$
\left[\eta_0, \sum_{n>0} q^n t^{-n}\eta_{-n}\eta_n\right] = 0.
$$

これは，前節の η_n の交換関係と，構造定数 f_l の満たす関係式

$$
f_{k+l} = f_k + q^k t^{-k} f_l
$$

から従う．高次の Hamiltonian を見つけるために若干形を整えて，I_2 を

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \eta_0\eta_0 + (1-t)\sum_{n>0} q^n t^{-n}\eta_{-n}\eta_n \\
&= \left[\eta(z)\eta(w)\frac{1-qw/z}{1-qt^{-1}w/z}\right]_1
\end{aligned}
$$

とおく．ここに，記号 $[\cdots]_1$ は Laurent 級数の定数項を取る演算である．同様に，I_m を

$$
I_m = \left[\eta(z_1)\cdots\eta(z_m)\prod_{1\le i<j\le m}\frac{1-qz_j/z_i}{1-qt^{-1}z_j/z_i}\right]_1
$$

と定めよう．

命題 3. Hamiltonian の族 $\{I_n\}_{n\ge1}$ は互いに交換する．即ち $[I_m, I_n] = 0$.

3.5 $\xi(z)$

構造定数 f_l に現れるパラメータ q, t を q^{-1}, t^{-1} で置き換えるように頂点作用素を作り替えても，Fock 空間の上に可積分構造を定めることができる．この頂点作用素を $\xi(z)$ としよう

$$
\begin{aligned}
\xi(z) &= \exp\left(-\sum_{n>0}\frac{1-t^{-n}}{n}a_{-n}q^{-n/2}t^{n/2}z^n\right) \\
&\quad \times \exp\left(+\sum_{n>0}\frac{1-t^{n}}{n}a_{n}q^{-n/2}t^{n/2}z^{-n}\right).
\end{aligned}
$$

$I'_1 = \xi_0$ とおき，高次の Hamiltonian I'_m を

$$
I'_m = \left[\xi(z_1)\cdots\xi(z_m)\prod_{1\le i<j\le m}\frac{1-q^{-1}z_j/z_i}{1-q^{-1}tz_j/z_i}\right]_1
$$

と定める．

命題 4. Hamiltonian の族 $\{I'_n\}_{n\ge1}$ は互いに交換する．即ち $[I'_m, I'_n] = 0$.

3.6 I_m と I'_n の可換性

では，2 種類の Hailtoniann たち I_m と I'_n の関係はどうなっているであろうか？

最も簡単な場合 $I_1 = \eta_0, I'_1 = \xi_0$ の関係を見て

みよう．そのために，$\eta(z)$ と $\xi(w)$ の交換関係を調べる．少し計算してみると

$$\eta(z)\xi(w)-\xi(w)\eta(z)=\frac{(1-q)(1-t^{-1})}{1-qt^{-1}}\times\left(\delta(q^{1/2}t^{-1/2}z/w)\varphi^{+}(q^{-1/4}t^{1/4}w)-\delta(q^{-1/2}t^{1/2}z/w)\varphi^{-}(q^{1/4}t^{-1/4}w)\right)$$

となっていることがわかる．ここに

$$\delta(z)=\sum_{n\in\mathbb{Z}}z^{n},$$

$$\varphi^{+}(q^{1/4}t^{-1/4}z)=\sum_{n\in\mathbb{N}}\varphi^{+}_{n}q^{-n/4}t^{n/4}z^{-n}$$

$$=\exp\left(-\sum_{n>0}\frac{1-t^{n}}{n}(1-t^{n}q^{-n})a_{n}z^{-n}\right),$$

$$\varphi^{-}(q^{-1/4}t^{1/4}z)=\sum_{n\in\mathbb{N}}\varphi^{-}_{-n}q^{-n/4}t^{n/4}z^{n}$$

$$=\exp\left(+\sum_{n>0}\frac{1-t^{-n}}{n}(1-t^{n}q^{-n})a_{-n}z^{n}\right).$$

ここで，$\varphi^{+}_{0}=\varphi^{-}_{0}=1$ であるから，

$$[I_1,I'_1]=[\eta_0,\xi_0]=\frac{(1-q)(1-t^{-1})}{1-qt^{-1}}(\varphi^{+}_{0}-\varphi^{-}_{0})=0$$

となることがわかる．もう少し調べると，次のような命題を得る[6]．

命題 5. 族 $\{I_m,I'_n\}_{m,n\geq 1}$ は互いに交換する．即ち $[I_m,I_n]=[I'_m,I'_n]=[I_m,I'_n]=0$.

4. Macdonald 多項式

4.1 分割に関すること

$\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\ldots)$ を分割とする．分割 λ の転置を λ' と書く（右下斜め 45 度の線に関する λ の転置である）．零ばかりからなる数列に対応する分割を $\emptyset$ と書く．

ドミナンス半順序 $\geq$ を

$\lambda\geq\mu\Leftrightarrow|\lambda|=|\mu|$ かつ,

すべての $i=1,2,\ldots$ について $\displaystyle\sum_{k=1}^{i}\lambda_k\geq\sum_{k=1}^{i}\mu_k$,

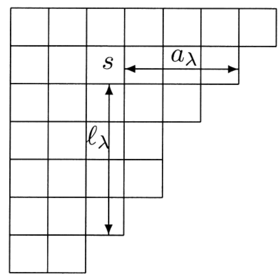
と定める．

分割 λ には，Young 図形が対応する．Young 図形の升目の座標を $\square=(i,j)$ とする．最初の座標 i が増えると下に，2 番目の座標 j が増えると右に進むものとする．

分割 λ に対応する Young 図形に含まれる升目 $\square=(i,j)$ に対して

$$a_\lambda(\square)=\lambda_i-j,\quad \ell_\lambda(\square)=\lambda'_j-i$$

と定める．a_λ は**アーム長**, ℓ_λ は**レッグ長**と呼ばれる．例として $\lambda=(7,6,5,4,4,3,2)$, $s=(i,j)=(2,3)$ とすると，$a_\lambda(s)=6-3=3$, $\ell_\lambda(s)=6-2=4$.



4.2 対称多項式環

Λ を，無限個の変数 $x=(x_1,x_2,\ldots)$ についての $\mathbb{Z}$ 上の対称多項式環とする．必要に応じて（体 $\mathbb{Q}$ 等を用いて）係数拡大を行い，$\Lambda_{\mathbb{Q}}:=\Lambda\otimes_{\mathbb{Z}}\mathbb{Q}$ 等と記す．**モノミアル対称多項式** m_λ を

$$m_\lambda=\sum_{\alpha:\lambda \text{ の異なる置換}}x^{\alpha}$$

と定める．また，**冪和対称多項式** p_n を

$$p_n=\sum_{i}x_i^{n}$$

と定める．また，分割 $\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\ldots)$ に対して $p_\lambda=p_{\lambda_1}p_{\lambda_2}\cdots$ とおく．

命題 6. (m_λ), (p_λ) は $\Lambda_{\mathbb{Q}}$ の基底である．

4.3 Macdonald 多項式

$\mathbb{F}=\mathbb{Q}(q,t)$ とする．

定理 1. **Macdonald 対称多項式** $P_\lambda(x;q,t)$ は次の 2 つの条件で一意的に特徴付けられる[8]．

(a) $P_\lambda=m_\lambda+\sum_{\mu<\lambda}u_{\lambda\mu}m_\mu\quad(u_{\lambda\mu}\in\mathbb{F})$,

(b) $\langle P_\lambda,P_\mu\rangle_{q,t}=0\quad(\lambda\neq\mu)$.

(P_λ) は $\Lambda_{\mathbb{F}}$ の基底である．

Fock 空間 $\mathcal{F}$ と対称多項式の空間 $\Lambda_{\mathbb{F}}$ を同一視すれば，Macdonald 多項式を特徴付ける定理 1 の条件 (b) を次の条件に置き換えることができる：

(b′) $\eta_0 P_\lambda = \epsilon_\lambda P_\lambda.$

そして，各固有空間の次元が 1 であることから次が従う[6]．

命題 7. Macdonald 多項式 P_λ は Hamiltonian の族 $\{I_m, I'_n\}_{m,n\geq 1}$ の同時固有関数である．

5. 量子代数

我々は，頂点作用素 $\eta(z), \xi(z), \varphi^+(z), \varphi^-(z)$ が成す代数と Macdonald 多項式との関係を調べてきた．実はこれは，Ding–Iohara 代数[5]の表現の一例となっている．この代数については三木による先駆的な研究がある[9]．その後の発展については文献 3) とその文献表を参照してほしい．

構造関数を

$$g(z) = \frac{G^+(z)}{G^-(z)},$$

$$G^\pm(z) = (1-q^{\pm 1}z)(1-t^{\mp 1}z)(1-q^{\mp 1}t^{\pm 1}z)$$

と定める．

定義 3 (Ding–Iohara)．単位的結合代数 $\mathcal{U}$ を次のように生成元と関係式で定める．生成元：中心元 $\gamma^{\pm 1/2}$ と，Drinfeld currents

$$x^\pm(z) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} x_n^\pm z^{-n}, \quad \psi^\pm(z) = \sum_{\pm n\in\mathbb{N}} \psi_n^\pm z^{-n}.$$

関係式：

$$\psi^\pm(z)\psi^\pm(w) = \psi^\pm(w)\psi^\pm(z),$$

$$\psi^+(z)\psi^-(w) = \frac{g(\gamma^{+1}w/z)}{g(\gamma^{-1}w/z)}\psi^-(w)\psi^+(z),$$

$$\psi^+(z)x^\pm(w) = g(\gamma^{\mp 1/2}w/z)^{\mp 1}x^\pm(w)\psi^+(z),$$

$$\psi^-(z)x^\pm(w) = g(\gamma^{\mp 1/2}z/w)^{\pm 1}x^\pm(w)\psi^-(z),$$

$$[x^+(z), x^-(w)] = \frac{(1-q)(1-1/t)}{1-q/t}$$

$$\times\Big(\delta(\gamma^{-1}z/w)\psi^+(\gamma^{1/2}w) - \delta(\gamma z/w)\psi^-(\gamma^{-1/2}w)\Big),$$

$$G^\mp(z/w)x^\pm(z)x^\pm(w) = G^\pm(z/w)x^\pm(w)x^\pm(z).$$

命題 8 (Ding–Iohara)．$\mathcal{U}$ は（無限和を許した意味で）Hopf 代数の構造を持つ．

余積 Δ:

$$\Delta(\gamma^{\pm 1/2}) = \gamma^{\pm 1/2}\otimes\gamma^{\pm 1/2},$$

$$\Delta(x^+(z)) = x^+(z)\otimes 1 + \psi^-(\gamma_{(1)}^{1/2}z)\otimes x^+(\gamma_{(1)}z),$$

$$\Delta(x^-(z)) = x^-(\gamma_{(2)}z)\otimes\psi^+(\gamma_{(2)}^{1/2}z) + 1\otimes x^-(z),$$

$$\Delta(\psi^\pm(z)) = \psi^\pm(\gamma_{(2)}^{\pm 1/2}z)\otimes\psi^\pm(\gamma_{(1)}^{\mp 1/2}z),$$

ここに $\gamma_{(1)}^{\pm 1/2} = \gamma^{\pm 1/2}\otimes 1$，また $\gamma_{(2)}^{\pm 1/2} = 1\otimes\gamma^{\pm 1/2}$．余単位射 ε と対合射 a は省略．

前節までに述べたことをここにまとめよう．頂点作用素 $\eta(z), \xi(z), \varphi^+(z), \varphi^-(z)$ の成す代数を抽象化して Hopf 代数 $\mathcal{U}$ を得た．そして，$\mathcal{U}$ の $\mathcal{F}$ の上の表現 $\rho(\cdot)$ が

$$\rho(\gamma^{\pm 1/2}) = (t/q)^{\pm 1/4}, \quad \rho(\psi^\pm(z)) = \varphi^\pm(z),$$

$$\rho(x^+(z)) = u\,\eta(z), \quad \rho(x^-(z)) = u^{-1}\xi(z),$$

によって与えられる[6]．

6. それから

我々は，Macdonald 多項式の理論を $\mathcal{U}$ という非可換代数とそれに付随した量子可積分系の立場から理解できることを述べた．のみならず，Hopf 代数 $\mathcal{U}$ の余積の構造を用いれば，様々なテンソル表現を研究することができる．そこに，**Nekrasov 分配関数**[10]，**（リファンンド）トポロジカルバーテックス**[1,7]，**AGT 現象**[4]等を代数的な視点から理解するための鍵がある．現在の理解の一端を紹介してこの話の結びとしたい．

3 つの Fock 空間に関する $\mathcal{U}$ **加群の射** $\Phi: \mathcal{F}_1\otimes\mathcal{F}_2\to\mathcal{F}_3$ を考えることができる（その双対 Φ^* :

$\mathcal{F}_1 \to \mathcal{F}_2 \otimes \mathcal{F}_3$ も）．ここで，各 Fock 空間にはそれぞれ異なった $\mathcal{U}$ 加群の構造（スペクトルパラメータと $\mathcal{U}$ の 2 つの中心元 γ と ψ_0^-/ψ_0^+ の値によって指定される）が与えられる．そのような付加データが，トポロジカルバーテックスの理論におけるローカル Calabi–Yau 多様体のトーリックグラフを指定するためのものとちょうど一致することは興味深い．

このような $\mathcal{U}$ 加群の射 Φ は適当な条件の下に一意的に存在する．それを，第一の Fock 空間 $\mathcal{F}_1$ に関する Macdonald 基底 (P_λ) 展開すれば，各成分 $\Phi_\lambda : \mathcal{F}_2 \to \mathcal{F}_3$ は上手く頂点作用素の形に書くことができる．かくして我々は，スペクトルパラメータ w を持ち，分割 λ でパラメトライズされた頂点作用素 $\Phi_\lambda(w)$ を得る．

$$
\begin{aligned}
\Phi_\lambda(w) &=: \Phi_\emptyset(w)\eta_\lambda(w) :, \\
\Phi_\emptyset(w) &= \exp\Big(-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\frac{1}{1-q^n}a_{-n}w^n\Big) \\
&\quad \times \exp\Big(-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\frac{q^n}{1-q^n}a_n w^{-n}\Big), \\
\eta_\lambda(w) &=: \prod_{i=1}^{\ell(\lambda)}\prod_{j=1}^{\lambda_i}\eta(q^{j-1}t^{-i+1}w) : .
\end{aligned}
$$

実は，この $\Phi_\lambda(w)$ の適当な基底に関する行列要素（つまり $\langle\mu|\Phi_\lambda(w)|\nu\rangle$, $\langle\mu| \in \mathcal{F}_3^*, |\nu\rangle \in \mathcal{F}_2$）は Iqbal–Kozcaz–Vafa ないし粟田–菅野のリファインドトポロジカルバーテックスと一致する[3)]．

（リファインド）トポロジカルバーテックスの理論によれば，あるトーリックグラフに対して計算を行えば，ゲージ群が $SU(N_c)$ の場合の（K 理論版）Nekrasov の分配関数

$$
Z_m^{\mathrm{inst}}(\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_{N_c}, \Lambda; q, t)
= \sum_{\lambda^{(1)},\ldots,\lambda^{(N_c)}} \frac{\prod_{\alpha=1}^{N_c}(v^{-N_c}\Lambda^{2N_c}(-\boldsymbol{e}_\alpha)^{-m})^{|\lambda^{(\alpha)}|} f_{\lambda^{(\alpha)}}^{-m}}{\prod_{\alpha,\beta=1}^{N_c} N_{\lambda^{(\alpha)},\lambda^{(\beta)}}(\boldsymbol{e}_\alpha/\boldsymbol{e}_\beta)}
$$

が得られる．ここに，f_λ は瀧のフレーミング因子[11)]，

$$
N_{\lambda,\mu}(u) = \prod_{\square\in\lambda}(1 - uq^{-a_\mu(\square)-1}t^{-\ell_\lambda(\square)}) \times \prod_{\blacksquare\in\mu}(1 - uq^{a_\lambda(\blacksquare)}t^{\ell_\mu(\blacksquare)+1}).
$$

一方，$\Phi_\mu(z)$ と $\Phi_\lambda(w)$ の演算子積は，λ, μ に依存しないある関数 $\mathcal{G}(z)$ と $N_{\lambda,\mu}(z)$ により

$$
\Phi_\mu(z)\Phi_\lambda(w) = \frac{\mathcal{G}(qt^{-1}w/z)}{N_{\lambda,\mu}(qt^{-1}w/z)} : \Phi_\mu(z)\Phi_\lambda(w) :
$$

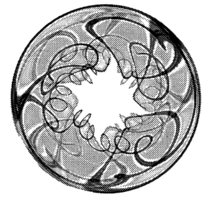
と書ける．これが，幾つかの頂点作用素 $\Phi_\lambda(w)$（とその双対 $\Phi_\lambda^*(w)$）の積の真空期待値が Nekrasov の分配関数と一致することの絡繰りである．

参考文献

1) H. Awata, H. Kanno, Refined BPS state counting from Nekrasov's formula and Macdonald functions, *Internat. J. Modern Phys. A* **24** (2009), no.12, 2253–2306.
2) M. Aganagic, A. Klemm, M. Mariño and C. Vafa, The Topological Vertex, *Commun. Math. Phys.* **254** (2005), 425–478.
3) H. Awata, B. Feigin and J. Shiraishi, Quantum Algebraic Approach to Refined Topological Vertex, arXiv:1112.6074.
4) L.F. Alday, D. Gaiotto, Y. Tachikawa, Liouville Correlation Functions from Four-dimensional Gauge Theories, *Lett. Math. Phys.* **91** (2010), 167–197.
5) J. Ding, K. Iohara, Generalization of Drinfeld quantum affine algebras, *Lett. Math. Phys.* **41** (1997), no.2, 181–193.
6) B. Feigin, K. Hashizume, A. Hoshino, J. Shiraishi, S. Yanagida, A commutative algebra on degenerate $\mathbb{CP}^1$ and Macdonald polynomials, *J. Math. Phys.* **50** (2009), no.9, 095215.
7) A. Iqbal, C. Kozcaz and C. Vafa, The refined topological vertex, *JHEP* **0910**, 069 (2009).
8) I.G. Macdonald, "Symmetric functions and Hall polynomials", 2nd ed., Oxford Mathematical Monographs, Oxford University Press (1995).
9) K. Miki, A (q, γ) analogue of the $W_{1+\infty}$ algebra, *J. Math. Phys.* **48** (2007), 123520.
10) N. Nekrasov, Seiberg–Witten prepotential from instanton counting, *Adv. Theor. Math. Phys.* **7** (2003), no.5, 831–864.
11) M. Taki, Refined Topological Vertex and Instanton Counting, *JHEP* **0803**, 048 (2008).

（しらいし・じゅんいち，東京大学大学院数理科学研究科）

量子力学と非可換幾何学



綿村　哲

1. はじめに

量子力学の発見における論理の飛躍は劇的なものであった．量子力学は古典力学から出発して，それを量子化することによって得られると教わる．しかし，最初量子力学を学ぶとき，この量子化の論理の飛躍は，大胆すぎて何となくご都合主義的に思え，なかなか納得できるものではなく学生を悩ませる．この感覚は実は場の量子論に行っても残り結局どこまでもついて回るのだが，それが正しい答えを与えるのだから仕方がない．これを恰好を付けてプラグマティズムと呼ぶわけである．

実は論理的にも物理的にも，逆に考えたほうがすっきりする．量子力学が正しい理論であることを受け入れ，プランク定数 $\hbar$ が十分小さいと思えるある種の極限状況で古典力学が成立していると考える．つまり「古典化」を考えると，これは理路整然としている．そして，量子化は古典化をすれば古典力学（または古典場の理論）に回帰するような理論を探す職人的手法なのである．

職人芸だから，量子化の手法にはいくつかの流派がある．代表的なのが正準量子化である．運動量を微分演算子に置き換えるといういわゆる置き換え則も，これを単純化したものであり，少し進むと Poisson 括弧を交換子で置き換えると表現される．一方，場の量子論で広く使われているのは経路積分による量子化であり，ファインマンの天才的な洞察力で編み出された．これらに比べて非可換幾何学と相性が良いのがここで紹介する変形量子化である．

2. 正準量子化

量子論というとシュレディンガー方程式を思い浮かべるだろう．シュレディンガー方程式とは，ハミルトニアン $H(q,p)$ の座標 q とそれに共役な運動量 p に $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$ という置き換えをすることで得られる

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q)=H\left(\hat{q},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q) \tag{1}$$

という波動関数 $\psi(q)$ に関する微分方程式のことである．ここで，$\hat{q}$ は波動関数に q をかける演算子と理解する．

この置き換え則は，量子化において座標と運動量が互いに可換でない演算子 $(\hat{q},\hat{p})$ になり，その交換子が

$$[\hat{q},\hat{p}]=\hat{p}\hat{q}-\hat{q}\hat{p}=i\hbar \tag{2}$$

となることを意味している．古典力学の相空間 (q,p) に導入される **Poisson 括弧** $\{\cdot,\cdot\}$ を思い出すと，この置き換え則は

$$[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar\{q,p\} \tag{3}$$

のように，Poisson 括弧を演算子の交換関係に置き換えることを意味する．これがいわゆる**正準量子化**である．

正準量子化では，交換関係 (2) さえ満たされれば良く，置き換え則は $\hat{p}$ を微分演算子と表現することでこの交換関係を実現しているに過ぎない．正準量子化の立場からは，この交換関係が重要なので，シュレディンガー方程式を書くときに座標 q を微分演算子 $\hat{q} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ と思ってもよいことになる．これによって運動量表示の波動関数 $\psi(p)$ に関するシュレディンガー方程式を得ることができる．

一般に物理量，つまり観測できる量は角運動量のように q, p の関数 $f(q,p)$ なので，量子化は物理量 $f(q,p)$ に関して，演算子 $\hat{f}$ を定義する．この $\hat{f}$ は基本的に $f(\hat{q},\hat{p})$ だが，pq といった積が現れると量子化に演算子の順序の不定性が生じる．量子力学では，対称積に対応させるワイル順序などが使われる．このようにして，古典的な相空間の関数の作る代数に対して，演算子の作る非可換代数を構成することが量子化と言える．

3. 変形量子化

量子化とは古典化によって古典力学に回帰する理論を見つける方法だと書いた．このことを積極的に前面に押し出したのが，**変形量子化**といえる．その説明に入る前にまず Poisson 括弧についてもう少し思い出しておこう．古典力学では Poisson 括弧は，座標 q^i とその正準共役運動量 p_i の関数 f, g に作用する**双微分演算子**として

$$\{f,g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q^i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q^i} \right) \qquad (4)$$

と定義される．もしも，曲がった空間上の粒子の運動などを考えるならば，座標もそれに応じた座標を取ることになり，Poisson 括弧は次のように一般化される．

一般に $2N$ 次元の空間 M を考え，その上の関数 $f, g, h \in C(M)$ を考える．Poisson 括弧 $\{\cdot,\cdot\}$ は，2 個の関数から 1 個の関数を作る演算で

$$\{f,g\} = -\{g,f\} \quad (\text{反対称性}), \qquad (5)$$

$$\{f,g+h\} = \{f,g\} + \{f,h\} \quad (\text{線形性}), \qquad (6)$$

$$\{f,gh\} = \{f,g\}h + g\{f,h\} \quad (\text{ライプニッツ則}) \qquad (7)$$

とヤコビ恒等式

$$\{f,\{g,h\}\}+\{g,\{h,f\}\}+\{h,\{f,g\}\}=0 \qquad (8)$$

を満たす．古典力学の通常の Poisson 括弧 (4) がこれらの関係式を満たすことは簡単に確認できる．

さてこのような一般化された Poisson 括弧は，空間 M の（局所）座標を x^i $(i = 1, \cdots, 2N)$ とすると次のような双微分演算子として表すことができる．

$$\{f,g\} = \theta^{ij}(\partial_i f)(\partial_j g). \qquad (9)$$

ただし，$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$ で，θ^{ij} は反対称テンソルで一般に座標 x^i の関数である*1)．

さてこのような**一般化された相空間**で量子化を考えたいのだが，正準量子化のように単に Poisson 括弧を交換子に置き換えるだけではすぐに破たんをきたすことが分かる．

そこで，次のような量子化の方法を考える．空間 M 上の関数 f, g の新しい積として次のような $\star$ **積**と呼ばれるものを定義する[1)]：

$$f \star g = fg + \sum_{n=1}^{\infty}(i\hbar)^n B_n(f,g). \qquad (10)$$

ここで，$B_n(f,g)$ は f と g それぞれに関して線形な双微分演算子で特に

$$B_1(f,g) - B_1(g,f) = i\hbar\{f,g\} \qquad (11)$$

を満たすとする．ただし，右辺の $\hbar$ に関する収束性は問わない．つまり $\hbar$ に関する形式的級数和と考える．さらに $\star$ 積は**結合則**

$$(f \star g) \star h = f \star (g \star h) \qquad (12)$$

を満たすことを要請する．定義から新しい積での交換関係は

$$[f \overset{\star}{,} g] \equiv f \star g - g \star f = i\hbar\{f,g\} + O(\hbar^2) \qquad (13)$$

---

*1) 以下では繰り返される添え字は和を取ることとし，和の記号 $\sum_i$ は省略する．

という古典化の条件を満たす．このように形式的 $\hbar$ 展開で与えられる関数の空間全体は $\star$ 積によって非可換代数をなし，それを以下では $\mathcal{C}_\star$ と呼ぶ．この非可換代数を得る手続きは**変形量子化**と呼ばれ，任意の **Poisson 多様体**，つまり Poisson 括弧の定義されている多様体でこのような $\star$ 積が構成できることが知られている[2]．

4. $M_\star$ 上のゲージ理論またはベクトル束

さて，このように非常に広いクラスの相空間の量子化が考えられるのだが，量子化の後の相空間について考えることは意味があるのだろうか？ 座標 (q,p) が非可換になった後，その“空間”を幾何学的に捉えることができるのだろうか？ この疑問に答えてくれるのが**非可換幾何学**である．非可換幾何学では，空間上の点や線を考える代わりにその空間上の関数の代数を考える．すべての幾何学的概念をその関数代数の言葉で書き表してしまえば，代数が一般に非可換になったとしてもその代数を幾何学的な対象と考えることができるだろう．そこで，非可換代数の背後にある幾何学的対象を非可換空間と呼ぶ．変形量子化で得られた代数 $\mathcal{C}_\star$ も同様に何らかの非可換空間上の関数代数と思うことができるだろう．$\mathcal{C}_\star$ の場合，我々は変形する元の空間を知っているので，この非可換空間は元の多様体 M の量子化と思うことができ，それを $M_\star$ と呼ぶことにする．つまり，$\mathcal{C}_\star$ は非可換空間 $M_\star$ 上の関数代数ということになる．

そこで，$M_\star$ 上のゲージ理論を構成することを考えよう．これは幾何学的には**線束**または一般に**ベクトル束**を考えることで非可換幾何学的にも基本的な対象である．まずスカラー場は，関数そのものなので今の場合 $\mathcal{C}_\star$ の元 $\psi \in \mathcal{C}_\star$ を考えればよい．また，**ゲージ変換**は一般に逆元を持つような $\Lambda \in \mathcal{C}_\star$ を考え，

$$\psi \longrightarrow \Lambda \star \psi \tag{14}$$

と考える．一般に場はバンドルの**切断**であり，代数的には**関数代数上の加群**と考える．ところが今の場合，場 ψ に関数 $f \in \mathcal{C}_\star$ をかけると

$$f \star \psi \longrightarrow f \star \Lambda \star \psi \neq \Lambda \star f \star \psi \tag{15}$$

なので共変性を損なう．これは，共変微分を考えるときとよく似た状況である．そこで，次のような**共変関数** $\hat{f}$ を考える[3]．

$$\hat{f} \star \psi \longrightarrow \hat{f}' \star \Lambda \star \psi = \Lambda \star \hat{f} \star \psi. \tag{16}$$

つまり，ゲージ変換で共変関数 $\hat{f}$ は

$$\hat{f}' = \Lambda \star \hat{f} \star \Lambda^{-1} \tag{17}$$

と変換する．ここで，$\mathcal{C}_\star$ から $\mathcal{C}_\star$ への写像全体を $C^1 = \mathrm{Hom}(\mathcal{C}_\star, \mathcal{C}_\star)$ とする．関数 f から $\hat{f}$ への写像を $\mathcal{D} \in C^1$ と書き

$$\mathcal{D} \ : \ f \ \mapsto \ \hat{f} = \mathcal{D}(f) = f + \mathcal{A}(f) \tag{18}$$

とする．ここで $\mathcal{A} \in C^1$ は $\mathcal{A} = \mathcal{D} - id$ で定義された写像である．すると，微小変換 $\Lambda \simeq 1 + i\lambda$ に関して $\mathcal{A}(f)$ の変化は (17) より

$$\delta_\lambda \mathcal{A}(f) = i[\lambda \overset{\star}{,} f] + i[\lambda \overset{\star}{,} \mathcal{A}(f)] \tag{19}$$

で与えられることが分かる．さらに，上の $\mathcal{A}(f)$ のゲージ変換の第一項も同様に $[\lambda \overset{\star}{,} \cdot] \in C^1$ と考えることができる．

そこで，$\mathcal{C}_\star$ から C^1 への写像 $d_\star : \mathcal{C}_\star \to C^1$ を考え，

$$d_\star \lambda = -[\lambda \overset{\star}{,} \cdot] : f \ \mapsto \ d_\star \lambda(f) = -[\lambda \overset{\star}{,} f] \tag{20}$$

と定義する．すると，写像 $\mathcal{A}$ のゲージ変換は

$$\delta_\lambda \mathcal{A} = -i(d_\star \lambda + [\mathcal{A} \overset{\star}{,} \lambda]) \tag{21}$$

と書くことができる．良く知られたゲージ場のゲージ変換との類似性が見えてきた．

5. 非可換微分幾何学

以上の議論から変形量子化に基づく非可換幾何学では写像 $\mathcal{A} \in C^1$ を 1 形式と考えればよいことが分かる．一般に p 個の関数 $f_k \in \mathcal{C}_\star (k = 1, \cdots, p)$ の反対称テンソル積 $\mathcal{C}_\star^{\wedge p}$ から $\mathcal{C}_\star$ へ

の写像$C^p=\mathrm{Hom}(\mathcal{C}_\star^{\wedge p},\mathcal{C}_\star)$ を考え，そこに微分 $d_\star : C^p \to C^{p+1}$ を定義することで，微分代数を構成できる．ただし，$C^0=\mathcal{C}_\star$ とする．微分 $d_\star$ は一般に **Gerstenhaber 括弧**を使って定義できるのだが，ここでは次数の低いところに関して具体的にあげておく．C^0 に関しては (20) そのもので，$\mathcal{A}\in C^1$ に関しては

$$d_\star\mathcal{A}(f\wedge g) = f\star\mathcal{A}(g)+\mathcal{A}(f)\star g-\mathcal{A}(f\star g) - (f\leftrightarrow g) \qquad (22)$$

と定義される．ただし，$f\wedge g$ は変数 f,g に関して反対称部分を取り出すことを意味する．

このように，写像 C^p は変数に関して反対称化しておくと，通常の微分幾何学における p 形式に対応し，$d_\star$ は外微分に対応していることが分かる．よって，$\mathcal{A}$ はゲージ場の 1 形式であり

$$\mathcal{F}=d_\star\mathcal{A}+\mathcal{A}\wedge\mathcal{A} \qquad (23)$$

は場の強さを与える．ただし写像間の $\wedge$ 積は，変数について反対称化することを意味する．$\mathcal{F}$ がゲージ変換に関してテンソルとして変換されることは

$$\mathcal{F}(f\wedge g)=[\mathcal{D}(f)\stackrel{\star}{,}\mathcal{D}(g)]-\mathcal{D}([f\stackrel{\star}{,}g]) \qquad (24)$$

と書けることから自明で，

$$\delta_\lambda\mathcal{F}=i[\lambda\stackrel{\star}{,}\mathcal{F}] \qquad (25)$$

で与えられる．

非可換幾何学上の場の理論を考える場合，物理的には非可換性が小さいときに，ほとんど通常の理論のように見えるような理論を構成する必要がある．しかし，上のように形式的に構成したゲージ理論はかなり通常の理論と異なる．例えばゲージパラメータを見ればそのことが理解できる．今 (14) のようなゲージ変換を考えると，その結果は $\hbar$ の形式的級数になる．連続した変換を考えるならば，ゲージパラメータも一般に $\lambda\in\mathcal{C}_\star$ と考える必要がある．ところが一般の $\mathcal{C}_\star$ の元は形式的 $\hbar$ 級数で与えられているので，$\lambda=\sum_k\hbar^k\lambda_k(x)$ と展開され，無限個の関数 $\lambda_k\in C(M)$ の自由度を持つ．それに伴い $\mathcal{A}$ にも無限個のゲージ場が含まれている．これでは非可換性が小さいという近似の下でも，無限個の粒子の含まれた理論になってしまう．この問題を解決してくれるのが次の **Seiberg–Witten 写像**である．

6. Seiberg–Witten 写像

Seiberg–Witten 写像は弦理論において見出された写像であるが，非可換空間上の場の理論の構成においても非常に重要な役割を果たす．Seiberg–Witten の見出したことは次のようにまとめることができる[4)]．いま通常の空間 M 上のゲージ場の 1 形式を a, その無限小変換のパラメータ $\lambda\in C(M)$ によるゲージ変換を

$$a \;\to\; a'=a+d\lambda \qquad (26)$$

とする．ただし d は外微分である．このとき，そのゲージ変換が

$$\mathcal{A}_{a+d\lambda}=\mathcal{A}_a-i(d_\star\tilde{\lambda}_a+[\mathcal{A}_a\stackrel{\star}{,}\tilde{\lambda}_a]) \qquad (27)$$

となるような

$$\mathcal{A}_a\in C^1,\quad \tilde{\lambda}_a\in\mathcal{C}_\star \qquad (28)$$

を与える写像 $(a,\lambda)\to(\mathcal{A}_a,\tilde{\lambda}_a)$ が存在する．

これは代数の積は変形されるが，ゲージ変換の変形は自明になるような場の選び方があることを意味する．よって，このようにして構成された非可換空間上のゲージ場 $\mathcal{A}_a$ は，可換極限のゲージ場 a と同じ自由度しか持たない．

Seiberg–Witten 写像の構成は次のような半古典近似，つまり $i\hbar$ の 1 次までの近似による解析を行うことで可能になる．前節で非可換空間上の微分代数を構成したが，$\star$ 積を $\hbar$ の 1 次まで残すと微分 $d_\star$ は

$$d_\theta\lambda(f)=\lim_{\hbar\to0}\frac{1}{i\hbar}d_\star\lambda(f)=-\{\lambda,f\} \qquad (29)$$

のように書け，よって

$$d_\theta\lambda=\theta^{ij}(\partial_j\lambda)\partial_i=(\partial_j\lambda)d_\theta x^j \qquad (30)$$

という微分を導入することができる．ここで，$d_\theta x^j = \theta^{ij}\partial_i$ だが，このように考えると λ のハミルトニアンベクトル場が 1 形式のように扱える．

ベクトル場にもこの類推は応用でき，ゲージ場 a_i は 1 形式として

$$a_\theta = \theta^{ij} a_j \partial_i = a_j d_\theta x^j \qquad (31)$$

で与えると，a_i のゲージ変換は

$$a_\theta \ \to \ a'_\theta = a_\theta + d_\theta \lambda \qquad (32)$$

と書ける．さらに場の強さ f_{ij} は

$$\begin{aligned} f_\theta &= d_\theta a_\theta \\ &= \frac{1}{2} f_{ij} d_\theta x^i \wedge d_\theta x^j \\ &= \frac{1}{2}(\partial_i a_j - \partial_j a_i) d_\theta x^i \wedge d_\theta x^j \end{aligned} \qquad (33)$$

と書くことができる．ここで，$\wedge$ 積は，

$$d_\theta x^i \wedge d_\theta x^j = \theta^{ii'} \partial_{i'} \wedge \theta^{jj'} \partial_{j'} \qquad (34)$$

というベクトル場 $\theta^{ik}\partial_k$ の反対称積で**多重ベクトル場**と呼ばれる．例えば，Poisson 括弧を与えている Poisson テンソルは 2 ベクトル場 $\theta = \frac{1}{2}\theta^{ij}\partial_i \wedge \partial_j$ である．d_θ は Lichnerowicz の**余境界演算子**で一般の多重ベクトルに関して **Schouten 括弧**[5] を使って定義され $d_\theta^2 = 0$ である．

Seiberg–Witten 写像を理解するには，次の **Moser の補題**が重要な役割を果たす[6]．これは，パラメータ t に連続によった Poisson テンソル θ_t を考え，ベクトル場 a_{θ_t} による連続的な変形を考える：

$$\partial_t \theta_t = L_{a_{\theta_t}} \theta_t. \qquad (35)$$

ここで，$L_{a_{\theta_t}}$ はベクトル場 a_{θ_t} による Lie 微分を表し，$L_{a_{\theta_t}}\theta_t = d_{\theta_t} a_{\theta_t}$ である．この微分方程式は時間によるベクトル場 a_{θ_t} の定めるフローを与える．特に θ_t は $\theta_0 = \theta$ とすると $\theta_t^{ij} = \theta^{ik}(1+tf\theta)_k^{-1j}$ と与えられる*2)．$t=0$ から 1 へのフローを求め ρ_a^* と表すと

$$\rho_a^*\{f, g\}_{\theta_1} = \{\rho_a^* f, \rho_a^* g\}_\theta \qquad (36)$$

という写像を与える（$\rho_a^*\theta_1 = \theta_0$）．ここで，Poisson 括弧の添え字はそれぞれを定義する Poisson テンソルを指す．次にゲージ場 a を無限小パラメータ λ によってゲージ変換すると ρ_a^* と $\rho_{a+d\lambda}^*$ という 2 つのフローは，ある a と λ によって決まる関数 λ_a のハミルトニアンベクトル場 $d_\theta\lambda_a$ による無限小変換で

$$\rho_{a+d\lambda}^* = (id + d_\theta \lambda_a) \circ \rho_a^* \qquad (37)$$

と書けることが分かる．

この ρ_a^* や λ_a を a_θ の級数として求めることができる．ここで重要なことは，写像 $A_a = \rho_a^* - id$ の変換性である．実際，A_a を関数 f に作用させて (37) を使うと

$$\delta_\lambda A_a(f) = -\{\lambda_a, f\} - \{\lambda_a, A_a(f)\} \qquad (38)$$

を得る．これが，ちょうど Seiberg–Witten 写像によって得られる $\mathcal{A}_a$ のゲージ変換の古典極限に相当することが分かる．よって，この微分方程式の構造をそのまま量子化してやることができれば良い．

7. Kontsevich の変形量子化

Kontsevich の**フォーマリティー写像**は n 個の k_i ベクトルから

$$m = 2 - 2n + \sum_{i=1}^{n} k_i \qquad (39)$$

を満たす m 微分演算子への写像 U_n の組で構成される．条件 (39) より，U_n を n 個の 2 ベクトル θ に作用させた $U_n(\theta, \cdots, \theta)$ は双微分演算子で，$\star$ 積の B_n を与える演算子である：

$$f \star g = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^n}{n!} U_n(\theta, \cdots, \theta)(f, g). \qquad (40)$$

ただし，$U_0(f, g) = fg$．同様に，k ベクトル α に対して写像

*2) 本来 Moser の補題はシンプレクティック形式に関する連続変形に関する結果で[7]，今考えている変形は θ_t が逆元を持つ（つまりシンプレクティックである）場合 $\theta_t^{-1} = \theta^{-1} + tf$ と書ける．

$$\Phi(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\hbar)^n}{n!} U_{n+1}(\alpha, \theta, \cdots, \theta) \quad (41)$$

は k 微分演算子を定義する．大切なことはこの写像で微分演算が

$$d_\star \Phi(\lambda) = i\hbar \Phi(d_\theta \lambda) \quad (42)$$

のように写像されることである．

さらに (40) と (41) の Poisson テンソルを θ_t に置き換えることによってパラメータ t に依存した $\star_t$ 積と写像 Φ_t を得る．これによって (35) の量子化に相当する微分方程式

$$\partial_t(f \star_t g) = d_\star \Phi_t(a_{\theta_t})(f, g) \quad (43)$$

を得る．この式は微分演算子 $\Phi_t(a_{\theta_t})$ による"量子フロー"を定める方程式と見ることができ，そのフロー $\mathcal{D}_a$ は ρ_a^* を量子化したものに相当する．よって

$$\mathcal{A}_a = \mathcal{D}_a - id \quad (44)$$

が求める非可換空間上のゲージ場である．さらに a のゲージ変換は θ を変えないので同じ $\star$ 積の間の変換になり，ある $\mathcal{C}_\star$ の元による共役変換で表されるような変換を引き起こすに過ぎない．すなわち a のゲージ変換は，ある非可換ゲージ変換のパラメータ $\tilde{\lambda}_a \in \mathcal{C}_\star$ によって (27) に与えられているような $\mathcal{A}_a$ の非可換ゲージ変換を引き起こす．これら $\mathcal{A}_a$ と λ_a を θ の級数展開として求めることができ，Seiberg–Witten 写像が完成される．

8. まとめ

$\star$ 積によって得られる非可換代数を量子化された空間上の関数代数と思い，そのようにして得られた非可換空間上でのゲージ場の理論の構成を紹介した．非可換幾何学へのアプローチとしては Connes に代表される C^* 代数に基づくアプローチがある[8]．その場合多様体上の関数代数にとらわれることなく理論を構成していくことができ，2 点空間のような微分幾何学的にはかなりエキゾチックな空間であっても微分代数を構成し，場の理論を展開することができた．弦理論の構成が 2 次元共形場の理論として構成され，その表現論などの理解が深まってきていることから，弦理論によって記述される幾何学を解析するにも Connes 的なアプローチが適当なように思われる．

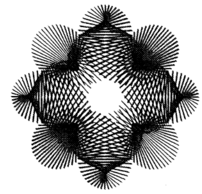
一方，ここで紹介した変形量子化を用いて非可換幾何学とその上で場の理論を構成するアプローチの長所は，考えている非可換空間の古典的対象が明らかで，非可換代数の表現を議論する前に古典からの変形を逐次取り入れていくことができることである．時空が何らかの形で変形されていると仮定するとき，その効果は非常に小さいはずなので，このような構成法は実用的である．実際，素粒子の標準模型などを非可換空間上で構成する試みもある[9]．しかし，実際に素粒子のモデルとして場の理論の作用を作ろうとしたときには，いくつかの任意性が存在することも知られている[10]．例えば，Seiberg–Witten 写像に任意パラメータが存在することが知られている．また積分の定義にもまだ任意性があり，物理の場の理論のモデルを作るときには，さらに何らかの新しいアイデアが必要である．

参考文献

1) F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz and D. Sternheimer, *Annals of Physics* **111** (1978) 61–110.
2) M. Kontsevich, *Letters in Mathematical Physics* **66** (2003) 157–216.
3) B. Jurco, P. Schupp and J. Wess, *Nuclear Physics B***584** [PM] (2000) 784–794.
4) J. Seiberg and E. Witten, *JHEP* **09** (1999) 032.
5) 例えば, A. Cannas da Silva, A. Weinstein, *Geometric Models for Noncommutative Algebras*, AMS, (1999).
6) B. Jurco and P. Schupp, "Noncommutative Yang-Mills from equivalence of star products" *Eur. Phys. J. C***14**, (2000) 367–370.
7) J. Moser, *Trans. Amer. Math. Soc.* **120** (1965) 286–294.
8) A. Connes, *Noncommutative Geometry*, Academic Press (1994).
9) 例えば，P. Aschieri, B. Jurco, P. Schupp and J. Wess, *Nuclear Physics B***651** (2003) 45.
10) 例えば, F. Brandt, *Springer Proc. Phys.* **98** (2005) 189–196.

（わたむら・さとし，東北大学大学院理学研究科）

量子力学とトポロジー



橋本 義武

量子力学がだいたいどんなものであるかを知るには，いかにも量子力学らしい，量子力学ならではの現象・事実について詳しく考察するのがよいだろう．そのようなものの一つとして，「電子がスピンという自由度をもっている」という事実がある．電子のスピンは自然科学の中で最も重要な概念である．ここでは，トポロジーで最も重要な図形である**ホップ束**を用いて電子のスピンの説明を試みる．

1. シュテルン＝ゲルラッハの実験

磁石というものがなぜあるかというと，電子一つ一つが磁石になっていてそれらの向きの分布に偏りがあるからである．電子は磁気双極子，すなわち棒磁石の長さを限りなく0に近づけたものの性質を有する．磁気双極子の強さは磁気モーメントという空間ベクトルによって記述される．$\mathbb{R}^{n+1}$ の中の単位ベクトル全体の集合 S^n を n 次元単位球面という．磁気モーメントの向きは2次元単位球面 S^2 に値をとる．

空間ベクトル $\boldsymbol{u} \in S^2$ に対し，磁気双極子の磁気モーメントの $\boldsymbol{u}$ 方向成分 $\mu_{\boldsymbol{u}}$ を測定することを考える．磁気双極子のビームを不均一な磁場に入射し，$\mu_{\boldsymbol{u}} > 0$ ならば $\boldsymbol{u}$ 方向に，$\mu_{\boldsymbol{u}} < 0$ ならば $-\boldsymbol{u}$ 方向にビームが曲げられるように作られた装置を $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ で表す．1922年，シュテルンとゲルラッハが銀原子のビームを用いてこのような装置で実験を行った．銀原子の磁気モーメントの大きさが一定であったとしても，向きはいろいろだから，ビームが分かれる方向は連続的に分布すると予想される．

ところがビームは2つに分かれた． 2つのビームは $\mu_{\boldsymbol{u}}$ の2つの値 $\pm\mu$ $(\mu > 0)$ に対応すると考えられる．

銀原子は都道府県や赤穂浪士と同じ47個の電子をもつ．$46 = 2+(2+6)+(2+6+10)+(2+6+10)$ 個の電子の磁気モーメントがたがいに打ち消しあう．次の1個の電子の軌道が回転対称なので，銀原子の磁気モーメントは電子1個の磁気モーメントに等しい（原子核の磁気モーメントは小さいので無視している）．したがってこの実験は，電子の磁気モーメントの $\boldsymbol{u}$ 方向成分を測定していることになる．結果は，これが2つの値 $\pm\mu$ しかとらないことを意味している．

次に，装置 $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ から出てくる $\mu_{\boldsymbol{u}} = \mu$ の銀原子をもう一つの $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ に入射する．今度はビームは分かれず，$\mu_{\boldsymbol{u}} = \mu$ の銀原子だけが出てくる．また，装置 $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ から出てくる $\mu_{\boldsymbol{u}} = -\mu$ の銀原子をもう一つの $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ に入射すると，$\mu_{\boldsymbol{u}} = -\mu$ の銀原子だけが出てくる．

また，たがいに直交する $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in S^2$ に対し，装置 $\mathrm{SG}(\boldsymbol{u})$ から出てくる $\mu_{\boldsymbol{u}} = \mu$ の銀原子を装置 $\mathrm{SG}(\boldsymbol{v})$ に入射する．これを繰り返すと，$\mu_{\boldsymbol{v}} = \pm\mu$ の銀原子がそれぞれ $\frac{1}{2}$ の確率で出てくる．

より一般に，$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in S^2$ のなす角が $0 \leq \theta \leq \pi$

であるとき，装置 SG($\boldsymbol{u}$) から出てくる $\mu_{\boldsymbol{u}} = \mu$ の銀原子を装置 SG($\boldsymbol{v}$) に入射する．これを繰り返すと，$\mu_{\boldsymbol{v}} = \mu$, $-\mu$ の銀原子がそれぞれ $\cos^2\frac{\theta}{2}$, $\sin^2\frac{\theta}{2}$ の確率で出てくる．

2. スピン

実験結果によると，電子の磁気モーメントの一つの方向の成分を固定すると，他の方向の成分が不確定になる．したがって，**電子の磁気モーメント・ベクトルという概念は放棄しなければならない**．しかし「磁気モーメントの成分」，そして「磁気モーメントの向き」には意味がある．装置 SG($\boldsymbol{u}$) から出てくる $\mu_{\boldsymbol{u}} = \mu$ の（銀原子の中の）電子は，「磁気モーメントの向き」が $\boldsymbol{u}$ である，ということにする．そして実験結果を次のように解釈する．測定もまた相互作用なのであり，磁気モーメントの $\boldsymbol{u}$ 方向成分を測定しようとすると，磁気モーメントの向きが $\pm\boldsymbol{u}$ のいずれかに変わってしまうのだと．

最後の実験の結果は，$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in S^2$ のなす角が $0 \leq \theta \leq \pi$ であるとき，磁気モーメントの向きが $\boldsymbol{u}$ である電子の磁気モーメントの $\boldsymbol{v}$ 方向成分を測定しようとすると，磁気モーメントの向きが $\boldsymbol{v}$, $-\boldsymbol{v}$ である電子がそれぞれ $\cos^2\frac{\theta}{2}$, $\sin^2\frac{\theta}{2}$ の確率で出現することを意味する．

この $\frac{\theta}{2}$ はどこの角度なのだろうか． これを実現するために，ベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ に対し，間の角度が $\frac{\theta}{2}$ であるようなベクトル $\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{v}}$ を考えたい．

たがいに直交する空間ベクトル $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3 \in S^2$ を固定する．**これとは別に平面を考え**，そこにたがいに直交する単位ベクトル $\boldsymbol{e}_+, \boldsymbol{e}_-$ をとる．そして写像 $\pi : S^1 \to S^1$ を

$$\pi\left(\cos\frac{\theta}{2}\cdot\boldsymbol{e}_+ + \sin\frac{\theta}{2}\cdot\boldsymbol{e}_-\right) = \cos\theta\cdot\boldsymbol{e}_3 + \sin\theta\cdot\boldsymbol{e}_1,$$

すなわち

$$\pi(x\boldsymbol{e}_+ + y\boldsymbol{e}_-) = (x^2 - y^2)\boldsymbol{e}_3 + 2xy\,\boldsymbol{e}_1$$

で定義する．特に，$\pi(\boldsymbol{e}_+) = \boldsymbol{e}_3$, $\pi(\boldsymbol{e}_-) = -\boldsymbol{e}_3$ である．2 対 1 の写像 $\pi : S^1 \to S^1$ を実ホップ写像と呼ぶ．この写像を用いると，最後の実験の結果を，$\boldsymbol{e}_+, \boldsymbol{e}_-$ を正規直交基底とする平面の内積 $\langle\ ,\ \rangle$ を用いて，

「磁気モーメントの向きが $\pi(\tilde{\boldsymbol{u}})$ である電子の磁気モーメントの $\pi(\tilde{\boldsymbol{v}})$ 方向成分を測定しようとすると，磁気モーメントの向きが $\pi(\tilde{\boldsymbol{v}})$ である電子が $\langle\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{v}}\rangle^2$ の確率で出現する」

と言い直すことができる．

写像 π の像が S^2 になるように拡張しなければならない．そこで写像 $\pi : S^3 \to S^2$ を，複素数 z, w で $|z|^2 + |w|^2 = 1$ を満たすものに対して，

$$\pi(z\boldsymbol{e}_+ + w\boldsymbol{e}_-) = (|z|^2 - |w|^2)\boldsymbol{e}_3 + 2z\overline{w}\,\boldsymbol{e}_1$$

で定義する．ただし $i\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{e}_2$ と解釈する．$\boldsymbol{e}_+, \boldsymbol{e}_-$ の張る複素ベクトル空間 Σ 上のエルミート内積を

$$\langle z\boldsymbol{e}_+ + w\boldsymbol{e}_-, z'\boldsymbol{e}_+ + w'\boldsymbol{e}_-\rangle = \overline{z}z' + \overline{w}w'$$

で定めると，最後の実験の結果を，

「磁気モーメントの向きが $\pi(\tilde{\boldsymbol{u}})$ である電子の磁気モーメントの $\pi(\tilde{\boldsymbol{v}})$ 方向成分を測定しようとすると，磁気モーメントの向きが $\pi(\tilde{\boldsymbol{v}})$ である電子が $|\langle\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{v}}\rangle|^2$ の確率で出現する」

と言い直すことができる．

シュテルン＝ゲルラッハの実験は，電子が複素 2 次元単位ベクトル $\tilde{\boldsymbol{u}} = z\boldsymbol{e}_+ + w\boldsymbol{e}_- \in S^3$ で表される自由度をもつことを示唆している．この自由度を**スピン**と呼ぶことにする．

3. ホップ束

写像 $\pi : S^3 \to S^2$ を複素ホップ写像，あるいは単にホップ写像と呼ぶ．

2 点 $s, s' \in S^3$ に対し，$\pi(s) = \pi(s')$ という条件は，絶対値 1 の複素数 ζ が存在して $s' = \zeta s$ となることと同値である．このことから S^2 の各点 $\boldsymbol{u}$ の逆像 $\pi^{-1}(\boldsymbol{u}) = \{s \in S^3 \mid \pi(s) = \boldsymbol{u}\}$ が S^1 と微分同相な多様体になることがわかる．

このように S^2 の各点に対して S^1 と微分同相な多様体が与えられていて全体が S^3 になっている．

同様に，$S^2 \times S^1$ から第1成分への射影 $\pi_1 : S^2 \times S^1 \to S^2$ の場合も，S^2 の各点 $\boldsymbol{u}$ に対して S^1 と微分同相な多様体 ${\pi_1}^{-1}(\boldsymbol{u}) = \{\boldsymbol{u}\} \times S^1$ が与えられていて全体が $S^2 \times S^1$ になっている．

S^3 から $S^2 \times S^1$ への微分同相は存在しない．しかし，

$$U_+ = S^2 \setminus \{-\boldsymbol{e}_3\}, \quad U_- = S^2 \setminus \{\boldsymbol{e}_3\}$$

とおくと，$S^2 = U_+ \cup U_-$ であり，そこで $\pi : S^3 \to S^2$ を $\pi^{-1}(U_+) \to U_+, \pi^{-1}(U_-) \to U_-$ に分けて考えると，

$$\begin{aligned}
&\widetilde{\varphi}_+ : \pi^{-1}(U_+) \to U_+ \times S^1, \\
&\qquad p = z\boldsymbol{e}_+ + w\boldsymbol{e}_- \mapsto \left(\pi(p),\, \frac{z}{|z|}\right), \\
&\widetilde{\varphi}_- : \pi^{-1}(U_-) \to U_- \times S^1, \\
&\qquad p = z\boldsymbol{e}_+ + w\boldsymbol{e}_- \mapsto \left(\pi(p),\, \frac{w}{|w|}\right)
\end{aligned}$$

がいずれも微分同相になる．$\widetilde{\varphi}_\pm$ は $U_\pm$ の各点 $\boldsymbol{u}$ に対して $\pi^{-1}(\boldsymbol{u})$ から ${\pi_1}^{-1}(\boldsymbol{u})$ への微分同相を与える．

多様体 E, B, F，C^∞ 写像 $\pi : E \to B$，B の開被覆 $\{U_\alpha\}_{\alpha \in I}$，微分同相

$$\widetilde{\varphi}_\alpha : \pi^{-1}(U_\alpha) \to U_\alpha \times F, \quad p \mapsto (\pi(p), \varphi_\alpha(p))$$

が与えられているとき，これらの組を B 上の**ファイバー束**という．微分同相 $\widetilde{\varphi}_\alpha$ を局所自明化といい，$\pi^{-1}(b)$ を $b \in B$ 上のファイバーという．ファイバーが離散的なファイバー束を特に被覆空間と呼ぶ．

ホップ写像 $\pi : S^3 \to S^2$ は，ファイバーが S^1 に微分同相であるような S^2 上のファイバー束を与える．これを**ホップ束**という．

ホップ写像による1点の逆像は，S^3 の中の2次元円板の境界になる．この円板は，他のファイバーと1点のみで交わるように取れる．ホップ束の2つのファイバーをホップ絡み目という．鎖はホップ絡み目が外れないことを応用した道具であり，指きりげんまんは，二人の小指でホップ絡み目に近い形をつくることで，おたがい約束を破らないことを誓う動作である，

電子のスピン $\Psi_0 \in S^3$ とは，磁気モーメントの向き $\pi(\Psi_0) \in S^2$ にホップ束のファイバー S^1 の分の自由度を付加したものなのである．

4. シュレーディンガー方程式

電子のスピン $\Psi_0 \in S^3$ のうち，$\pi(\Psi_0) \in S^2$ は磁気モーメントの向きを表すが，ファイバー S^1 の分の自由度の物理的意味は何だろうか．

1924年にドブロイにより提唱された電子の波動性は，1927年に G. P. トムソンの実験，デイヴィソン＝ジャマーの実験により確かめられた．

電子の平面波は，ホップ束のファイバー S^1 の自由度をくるくる回して，

$$\Psi(\boldsymbol{x}, t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - Et)}\Psi_0 \in \Sigma = \mathbb{C}\boldsymbol{e}_+ + \mathbb{C}\boldsymbol{e}_-$$

と記述される．Ψ を波動関数という．これは自由電子（力を受けていない電子）を表す．$\hbar$ は（プランク定数）$/2\pi$，$\boldsymbol{p}$ は運動量，E はエネルギー，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)$ は位置，t は時刻である．∂_t, ∂_j を t, x_j に関する偏微分とすると，エネルギーと運動量は

$$i\hbar\partial_t\Psi = E\Psi, \quad -i\hbar\partial_j\Psi = p_j\Psi$$

のように，波動関数を固有ベクトルとする，微分作用素に関する固有値として現れる．

エネルギーは運動量で決まるが，宇宙には特別な方向がないと考えられるので，E は $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}$ の関数になる．遅い電子，すなわち $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}$ が小さい場合，$E = E_0 + \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}$ と近似される．m は電子の質量である．このとき平面波 $\Psi(\boldsymbol{x}, t)$ は，自由電子のシュレーディンガー方程式

$$(i\hbar\partial_t - E_0)\Psi = \frac{1}{2m}(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\cdot(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\Psi \quad (1)$$

を満たす．$\boldsymbol{\nabla} = (\partial_1, \partial_2, \partial_3)$ である．

シュレーディンガー方程式 (1) は時間・空間の並進

$$t \to t+\tau, \quad \boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}+\boldsymbol{\xi}$$

について不変である．

5. 回転対称性

問題は空間の回転対称性である．

行列 A に対し，(i, j) 成分が A の (j, i) 成分に等しい行列 A^{T} を A の転置という．正方行列 P で P^{T} が P の逆行列になるものを直交行列という．n 次実直交行列全体の集合 $O(n)$ は積について群をなす．これを n 次直交群と呼ぶ．そのうち行列式が 1 であるもの全体のなす部分群 $SO(n)$ を n 次回転群と呼ぶ．

群 G が集合 X に作用するとは，写像

$$G \times X \to X, \quad (g, x) \mapsto g \cdot x$$

であって $(g_1 g_2) \cdot x = g_1 \cdot (g_2 \cdot x)$, $e \cdot x = x$ を満たすものが与えられていることをいう．群 G が集合 X, Y に作用するとき，写像 $\varphi : X \to Y$ で $\varphi(g \cdot x) = g \cdot \varphi(x)$ を満たすものを G 同変写像という．

行列と列ベクトルの積により，$SO(n)$ は $\mathbb{R}^n$ に作用する．この作用は単位球面 $S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$ への作用を誘導する．

群 $SO(3)$ は S^2 に作用しているが，ホップ写像 $\pi : S^3 \to S^2$ が $SO(3)$ 同変になるような $SO(3)$ の S^3 への作用は存在しない．となると，このままでは $\Sigma = \mathbb{C}^2$ に値をとる波動関数に関するシュレーディンガー方程式 (1) の回転対称性を議論することができない．

そこで以下のように考える．

複素行列 A に対し，(i, j) 成分が A の (j, i) 成分の複素共役に等しい行列 $A^{\dagger}$ を A のエルミート共役という．複素正方行列 P で $P^{\dagger}$ が P の逆行列になるものをユニタリ行列という．n 次ユニタリ行列全体の集合 $U(n)$ は積について群をなす．これを n 次ユニタリ群と呼ぶ．そのうち行列式が 1 であるもの全体のなす部分群 $SU(n)$ を n 次特殊ユニタリ群と呼ぶ．

群 $SU(n)$ は $\mathbb{C}^n$ に作用する．この作用は単位球面 $S^{2n-1} \subset \mathbb{C}^n$ への作用を誘導する．

複素正方行列 A で $A^{\dagger} = A$ となるものをエルミート行列といい，$A^{\dagger} = -A$ となるものを反エルミート行列という．n 次反エルミート行列でトレースが 0 のもの全体のなす $n^2 - 1$ 次元実ベクトル空間を $\mathfrak{su}(n)$ と書く．群 $SU(n)$ は $\mathfrak{su}(n)$ に $g \cdot x = gxg^{\dagger}$ によって作用する．$\mathfrak{su}(n)$ 上に，$\langle x, y \rangle = \frac{1}{n}\mathrm{tr}(x^{\dagger} y)$ によって内積を入れると，群 $SU(n)$ の作用はこの内積を保つので，群の準同型 $\rho_n : SU(n) \to SO(n^2 - 1)$ を誘導する．像が $SO(n^2 - 1)$ に入ることは $SU(n)$ が連結な位相空間であることからわかる．

複素 2 次エルミート行列

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

をそれぞれ $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ とおき，これらをパウリ行列と呼ぶ．$i\sigma_1, i\sigma_2, i\sigma_3$ は $\mathfrak{su}(2) = \mathbb{R}^3$ の正規直交基底である．

準同型 $\rho_2 : SU(2) \to SO(3)$ はファイバーが 2 点である被覆空間を与える．この準同型によって $SU(2)$ が S^2 に作用し，ホップ写像 $\pi : S^3 \to S^2$ は $SU(2)$ 同変になる．そして，$SU(2)$ の作用する Σ に値をとる波動関数に関するシュレーディンガー方程式 (1) は，$SU(2)$ の作用で不変である．この意味で，シュレーディンガー方程式は回転対称性をもつ．

6. ゲージ対称性

$\Psi = \Psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ がシュレーディンガー方程式 (1) の解ならば，$\Psi = \mathrm{e}^{i\theta}\Psi_1(\boldsymbol{x}, t)$ $(\theta \in \mathbb{R})$ も解である．このことを，方程式 (1) は大域ゲージ変換 $\Psi \to \mathrm{e}^{i\theta}\Psi$ で不変である，と表現する．

θ が $(\boldsymbol{x}, t)$ に依存するとき，$\Psi \to \mathrm{e}^{i\theta(\boldsymbol{x}, t)}\Psi$ を局所ゲージ変換という．$\theta(\boldsymbol{x}, t)$ の偏導関数が現れるため，方程式 (1) は局所ゲージ変換で不変ではない．

局所ゲージ変換で不変な方程式を得るため，以下

のように方程式 (1) を書き直して，これに $\theta(\boldsymbol{x}, t)$ の偏導関数を吸収する項を加える．

パウリ行列は $\sigma_j{}^2 = I$（単位行列），$\sigma_j\sigma_k = -\sigma_k\sigma_j\ (j \neq k)$，すなわち

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk}I$$

を満たす．$\delta_{jj} = 1$, $\delta_{jk} = 0\ (j \neq k)$ はクロネッカーのデルタである．

$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ とおくとき，微分作用素 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla} = \sum_{j=1}^{3}\sigma_j\partial_j$ をディラック作用素という．$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})^2 = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}$ なので，方程式 (1) は

$$(i\hbar\partial_t - E_0)\Psi = \frac{1}{2m}(-i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})^2\Psi$$

と書ける．定数 E_0 を関数 $V_0(\boldsymbol{x}, t)$ に変え，ポテンシャル項 $\boldsymbol{V} = (V_j(\boldsymbol{x}, t))_{j=1,2,3}$ を付加して $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \boldsymbol{V}$ とおくとき，方程式

$$(i\hbar\partial_t - V_0)\Psi = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2\Psi \qquad (2)$$

をパウリ方程式という．パウリ方程式は局所ゲージ変換

$$\Psi \to \mathrm{e}^{i\theta}\Psi, \quad V_0 \to V_0 - \hbar\partial_t\theta, \quad \boldsymbol{V} \to \boldsymbol{V} + \hbar\nabla\theta$$

で不変になる．$V_0, \boldsymbol{V}$ は電磁場のスカラー・ポテンシャル，ベクトル・ポテンシャルと解釈することができる．このように，**局所ゲージ対称性を要請すると必然的に電磁場が現れる**のである．

微分作用素 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2$ を計算すると，

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + i\hbar\sum_{1\le j<k\le 3}\sigma_j\sigma_k(\partial_jV_k - \partial_kV_j)$$

となり（ワイツェンベック公式），磁場の項 $\sigma_j\sigma_k(\partial_jV_k - \partial_kV_j)$ が磁気モーメントの向き $\pi(\Psi)$ の変化を引き起こすことがわかる．この結論は，最初に述べたシュテルン＝ゲルラッハの実験と辻褄が合っている．

パウリ方程式 (2) の解 Ψ に対し，

$$\partial_t\langle\Psi, \Psi\rangle = -\frac{1}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot(\langle\hat{\boldsymbol{p}}\Psi, \Psi\rangle + \langle\Psi, \hat{\boldsymbol{p}}\Psi\rangle)$$

が成り立つ．この等式より，$\langle\Psi, \Psi\rangle$ を確率密度と解釈できる．

$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{0}$ の場合，パウリ方程式は2つの成分それぞれについての方程式，すなわちポテンシャル V_0 に対するシュレーディンガー方程式に分かれる．

7. ディラック方程式

このように，局所ゲージ対称性の要請から電磁場の中の電子を表すパウリ方程式 (2) が得られたが，そのために付加したポテンシャル項は，自由電子のシュレーディンガー方程式 (1) のもっていた時間・空間の並進対称性と空間の回転対称性を破ってしまう．これらの対称性を回復するために，電磁場を外部の条件として固定するのでなく，電磁場のスカラー／ベクトル・ポテンシャルを未知関数とみなす．その運動方程式がこれらの対称性をもっていればよい．

電磁場の運動方程式はマクスウェル方程式である（それは例えば電流と磁場の間の定量的関係を記述する．ここにも円電流と閉じた磁力線という姿でホップ絡み目が現れる）．マクスウェル方程式は，時間・空間の並進対称性と空間の回転対称性を含むローレンツ対称性をもつ．すなわち，c を光速，$x_0 = ct$ とすると，ローレンツ計量

$$\begin{aligned}\eta &= \mathrm{d}x_0{}^2 - \mathrm{d}x_1{}^2 - \mathrm{d}x_2{}^2 - \mathrm{d}x_3{}^2 \\ &= \sum_{\mu,\nu}\eta_{\mu\nu}\mathrm{d}x_\mu\cdot\mathrm{d}x_\nu \quad (\eta_{\mu\nu} = \eta_{\nu\mu})\end{aligned}$$

を保つ座標変換についてマクスウェル方程式は不変である．ローレンツ計量 η は，時空における粒子の軌跡

$$C : (x_\mu(\tau))_{\mu=0,1,2,3}, \quad \tau_0 \le \tau \le \tau_1$$

に固有時間

$$\int_C\sqrt{\eta} = \int_{\tau_0}^{\tau_1}\sqrt{\sum_{\mu,\nu}\eta_{\mu\nu}\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}\tau}\cdot\frac{\mathrm{d}x_\nu}{\mathrm{d}\tau}}\,\mathrm{d}\tau$$

を対応させるものである．これはパラメータの取り方によらない．

電子に対しても電磁場と同じくローレンツ対称性を課す，というのが相対論のアイデアである．そこでローレンツ不変な電子の波動方程式を見つけ

よう．そのために，空間のディラック作用素 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla$ を時空に拡張することを考える．

N 次複素行列 $\gamma_\mu\,(\mu=0,1,2,3)$ を，

$$\gamma_\mu\gamma_\nu+\gamma_\nu\gamma_\mu=2\eta_{\mu\nu}I$$

を満たすものとする．$D=\sum_{\mu=0}^{3}\gamma_\mu\partial_\mu$ をディラック作用素という．これは

$$D^2=\sum_{\mu=0}^{3}\eta_{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu={\partial_0}^2-{\partial_1}^2-{\partial_2}^2-{\partial_3}^2$$

を満たす．

$\mathbb{C}^N$ に値をとる波動関数 $\Psi(x_0,x_1,x_2,x_3)$ に関する波動方程式 $(i\hbar D-mc)\Psi=0$ を自由電子のディラック方程式という．前と同様に，局所ゲージ対称性をもつようにこれにポテンシャル項を付加して，電磁場の中の電子のディラック方程式が得られる．

問題は N をいくつに取れるかだが，次節で見るように $N=4$ とすることができる．

8. クリフォード代数

正則な n 次実対称行列 $Q=(\eta_{ab})$ は，座標変換 $Q\mapsto PQP^{\mathrm{T}}$ により，$\eta_{aa}=1\ (a\le p)$, $\eta_{aa}=-1\ (a>p)$, $\eta_{ab}=0\ (a\ne b)$ とすることができる．

$$\gamma_a\gamma_b+\gamma_b\gamma_a=2\eta_{ab}$$

を満たす γ_a によって実数体 $\mathbb{R}$ 上で生成される代数 $C(p,n-p)$ をクリフォード代数という．パウリ行列は $C(3,0)$ の生成元を与える．

$p=n-p=k$ のとき，(η_{ab}) を $\mathbb{R}^k\oplus(\mathbb{R}^k)^*$ 上の自然な対称双線形形式とみなすことにより，$C(k,k)$ と外積代数 $\bigwedge\mathbb{R}^k=\mathbb{R}^{2^k}$ 上の行列環との間の同型が得られる．

$C(p,q)\otimes_{\mathbb{R}}\mathbb{C}$ は $p+q$ が等しければたがいに同型になり，さらに $p+q=2k$ が偶数のとき，$\bigwedge\mathbb{C}^k=\mathbb{C}^{2^k}$ 上の行列環と同型になる．したがって，$C(1,3)$ の場合，その元を $4=2^2$ 次複素正方行列で表現することができるのである．

${\gamma_1}^2=\pm{\gamma_2}^2$ の場合，$\gamma'_j=\gamma_1\gamma_2\gamma_j\ (j>2)$ は γ_1,γ_2 と可換で，

$$\gamma'_j\gamma'_k+\gamma'_k\gamma'_j=\mp\eta_{jk}$$

を満たす．したがって，

$$\begin{aligned}C(p+1,q+1)&\cong C(1,1)\otimes C(p,q),\\ C(p+2,q)&\cong C(2,0)\otimes C(q,p),\\ C(p,q+2)&\cong C(0,2)\otimes C(q,p)\end{aligned}$$

が得られ，これを用いて

$$\begin{aligned}C(p+4,q)&\cong C(p,q+4),\\ C(p+8,q)&\cong C(4,4)\otimes C(p,q)\\ &\cong C(p,q+8)\end{aligned}$$

が言える．

スピンの理解のために導入されたクリフォード代数やディラック作用素は，トポロジーの要であるK理論において基本的な働きをする．K理論は一方で，ホップ写像の一般化についてのある問題の解決の簡略化を与えた．

C^∞ 写像 $f:S^{2n-1}\to S^n$ に対し，$f^{-1}(b)$ の各点で f の微分が全射であるとき，$f^{-1}(b)$ を正則ファイバーという．これは S^{2n-1} の $n-1$ 次元部分多様体であり，n 次元部分多様体 M の境界になる．M として他の正則ファイバーと1点で交わるものが存在するか，という問題を考える．$n=1,2$ のときは実ホップ写像，複素ホップ写像が，$n=4,8$ のときは四元数ホップ写像，八元数ホップ写像というものがあり，そのような M が存在する例になる．これら以外の n に対してはそのような M は存在しないことが，K理論によって証明されるのである．

（はしもと・よしたけ，東京都市大学知識工学部）

Wigner–Yanase 歪情報量に関連する不等式

日合　文雄

はじめに

量子物理，量子情報理論，量子情報幾何などの分野では Wigner–Yanase の名前をよく見かける．これは Wigner–Yanase 歪情報量を提唱した 1963 年の論文[28]に始まる古くて新しい話題である．本稿では Wigner–Yanase–Dyson–Lieb の凹凸性から始めて情報理論の最近の発展に至るまでの大まかな歴史を解説する．ここで取り扱う歪情報量や擬エントロピーなどは無限次元ヒルベルト空間上の作用素に対しても，さらに von Neumann 環の設定でも研究されているが，以下では簡単のため，有限次元の行列の場合に限定して説明する．

最初に，行列に関する記号をいくつか準備しておく．$\mathbf{M}_n$ は $n\times n$ 行列全体，$\mathbf{M}_n^{sa}$ は $n\times n$ エルミート行列全体，$\mathbf{M}_n^+$ は $n\times n$ 半正定値行列全体，$\mathbf{P}_n$ は $n\times n$ 正定値行列全体を表す．$X\in\mathbf{M}_n$ のトレースを $\mathrm{Tr}\,X$ と表す．

1. WYD 歪情報量と Lieb–Ando の凹性

1963 年に Wigner–Yanase[28]は，密度行列 ρ，エルミート行列 K と $p\in(0,1)$ に対して

$$I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p,K):=-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,[\rho^p,K]\,[\rho^{1-p},K]$$

と定義される **WYD 歪情報量**を導入した．（筆者は skew information の「skew」を「歪」と訳すのが適当であるかどうか自信がない．）ここでブラケット記号は交換子 $[X,Y]:=XY-YX$ を意味する．$p=1/2$ の場合の

$$I_\rho^{\mathrm{WY}}(K):=-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,[\rho^{1/2},K]^2$$

が本来の Wigner–Yanase 歪情報量であり，Dyson が $0<p<1$ の場合に拡張した．これは保存量 K に関して密度行列 ρ で表される状態が含む情報量を意味し，ρ と K の非可換性の度合いを表すものである．Wigner–Yanase は論文[28]で，$I_\rho^{\mathrm{WY}}(K)$ が歪情報量として満たすべき以下の性質を示した．

状態混合に対する凸性． エルミート行列 K と密度行列 ρ,σ に対して

$$I_{\lambda\rho+(1-\lambda)\sigma}^{\mathrm{WY}}(K)\le\lambda I_\rho^{\mathrm{WY}}(K)+(1-\lambda)I_\sigma^{\mathrm{WY}}(K),\quad 0\le\lambda\le 1.$$

テンソル合成に対する加法性． エルミート行列 K_1,K_2 と密度行列 ρ_1,ρ_2 に対して，$\rho:=\rho_1\otimes\rho_2$, $K=K_1\otimes I+I\otimes K_2$ とすると

$$I_\rho^{\mathrm{WY}}(K)=I_{\rho_1}^{\mathrm{WY}}(K_1)+I_{\rho_2}^{\mathrm{WY}}(K_2).$$

時間発展に対する保存性． K が時間発展のエルミート行列 H と可換ならば，密度行列 ρ に対して $\rho_t:=e^{itH}\rho e^{-itH}$ $(t\in\mathbf{R})$ とすると

$$I_{\rho_t}^{\mathrm{WY}}(K)=I_\rho^{\mathrm{WY}}(K).$$

上の性質は最初の凸性を除いて WYD 歪情報量 $I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p,K)$ に対しても簡単に示せる．WYD 歪

情報量の凸性はしばらく未解決であったが，1973年にLieb[22]は，$p,q\geq 0$ で $p+q\leq 1$ のとき，任意の $X\in\mathbf{M}_n$ に対して

$$(A,B)\in\mathbf{M}_n^+\times\mathbf{M}_n^+\longmapsto \operatorname{Tr}X^*A^pXB^q \quad (1)$$

の同時凹性を示した．ここで

$$I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p,K)=\operatorname{Tr}\rho K^2-\operatorname{Tr}K\rho^pK\rho^{1-p}$$

であるから，$\rho\mapsto I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p,K)$ の凸性がいえる．Liebは同じ論文で，$\operatorname{Tr}X^*A^pXB^q$ が $p,q\leq 0$ かつ $p+q\geq -1$ のとき $(A,B,X)\in\mathbf{P}_n\times\mathbf{P}_n\times\mathbf{M}_n$ の3変数について同時凸であること，$-1\leq p,q\leq 0$ のとき $(A,B)\in\mathbf{P}_n\times\mathbf{P}_n$ について同時凸であることなども示した．これらはまとめて**WYDL凹凸性**と呼ばれることが多い．

不確定性・曖昧さを表す量がエントロピーであり，それが解消されたときに得られる量が情報量であるという考え方が，情報理論における基本である．したがって，エントロピーと情報量は裏と表の関係にある．梅垣[27]は古典情報理論で有用なKullback–Leiblerダイバージェンスを拡張して，トレースをもつvon Neumann環の場合に**相対エントロピー**を導入した．これは，行列環の場合には，2つの密度行列 ρ,σ に対して

$$S(\rho\|\sigma):=\operatorname{Tr}\rho(\log\rho-\log\sigma)$$

と定義される．2つの密度行列 ρ,σ に対して，$\operatorname{Tr}X^*\sigma^pX\rho^{1-p}$ を $p=0$ で微分すると，

$$\lim_{p\searrow 0}\frac{1}{p}(\operatorname{Tr}X^*\sigma^pX\rho^{1-p}-\operatorname{Tr}X^*X\rho)$$
$$=\operatorname{Tr}(X^*(\log\sigma)X\rho-X^*X\rho\log\rho)$$

はLiebの凹性から (ρ,σ) の凹関数である．$X=I$ とすると，$S(\rho\|\sigma)$ が (ρ,σ) について同時凸であることが分かる．Araki[4]は一般のvon Neumann環上の正規状態 φ,ψ に対する相対エントロピー $S(\varphi\|\psi)$ を導入し，下半連続性，同時凸性，単調性，マルチンゲール収束などの性質を証明した．その際に，相対モジュラー作用素を用いて一般化されたWYDL凹性も示した．後にKosaki[17]は相対エントロピーの変分表示を与え，それを用いて相対エントロピーの上記の性質を簡便に証明した．

他方，1979年にAndo[2]は，$A,B\in\mathbf{P}_n$ と $p,q\in\mathbf{R}$ に対して A^p,B^q のテンソル積 $A^p\otimes B^q$ $(\in\mathbf{M}_n\otimes\mathbf{M}_n\cong\mathbf{M}_{n^2})$ を対応させる写像を考えて，Liebの凹凸性の新しい定式化を与えた．Andoは

$$(A,B)\in\mathbf{P}_n\times\mathbf{P}_n\mapsto A^p\otimes B^q$$

が半正定値性から決まる行列の順序に関して同時凹であるための必要十分条件は $p,q\geq 0$ かつ $p+q\leq 1$ であり，また同時凸であるための必要十分条件は $-1\leq p,q\leq 0$，または $-1\leq p\leq 0$, $1-p\leq q\leq 2$，または $-1\leq q\leq 0, 1-q\leq p\leq 2$ であることを示した．Liebの凹凸性がトレース関数に対するものであるのに対し，Andoのそれは行列の順序に関するものであるが，実は両者は同値である．$\mathbf{M}_n$ はHilbert–Schmidt内積 $\langle X,Y\rangle_{\mathrm{HS}}:=\operatorname{Tr}X^*Y$ によりHilbert空間となる．$A,B\in\mathbf{M}_n$ に対して $\pi(A\otimes B)X:=AXB^t$ (B^t は B の転置）と定義すると，π は $\mathbf{M}_n\otimes\mathbf{M}_n$ の $(\mathbf{M}_n,\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathrm{HS}})$ 上の忠実 $*$ 表現であり，

$$\langle X,\pi(A^p\otimes(B^t)^q)X\rangle_{\mathrm{HS}}=\operatorname{Tr}X^*A^pXB^q$$

が成立する．これよりLiebとAndoの凹凸性の同値性が分かる．Wigner–Yanase歪情報量に関連する1980年くらいまでの歴史をまとめると，WYDL凹性を延長してWYDLAA凹凸性（Wigner–Yanase–Dyson–Lieb–Araki–Ando）と呼ぶのが適当であると筆者は考える．

■ 2. Kosakiの仕事とPetzの擬エントロピー ■

1982年にKosaki[16]はWYDL凹性の補間理論による定式化を与え，一般のvon Neumann環の設定でWYDL凹性を作用素単調関数を含む形に一般化した．1985年にPetz[24]は相対エントロピーを一般化することを目的として，別の方法でKosakiと同様な結果を得た．以下では，有限次元の場合の論文[25]に基づいて説明する．

f を $(0,\infty)$ 上の連続な実数値関数とする．可逆な密度行列 ρ,σ に対して，$\mathbf{L}_\rho X:=\rho X$, $\mathbf{R}_\sigma X:=X\sigma$ $(X\in\mathbf{M}_n)$ で定義される左・右掛け算作用

素は $(\mathbf{M}_n, \langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathrm{HS}})$ 上の可換な正作用素であるから，$f(\mathbf{L}_\rho \mathbf{R}_\sigma^{-1})$ が関数カリキュラスで定まる．Petz は，$X \in \mathbf{M}_n$ に関する ρ, σ の**擬（相対）エントロピー**（**量子 f-ダイバージェンス**とも呼ばれる）を

$$S_f^X(\rho\|\sigma) := \langle X, f(\mathbf{L}_\rho \mathbf{R}_\sigma^{-1})\mathbf{R}_\sigma X\rangle_{\mathrm{HS}}$$
$$= \langle X\sigma^{1/2}, f(\mathbf{L}_\rho \mathbf{R}_\sigma^{-1})(X\sigma^{1/2})\rangle_{\mathrm{HS}}$$

と定義した．これについて次の 2 つの性質が重要である．

単調性． f が作用素単調で $f(+0) \geq 0$ であり，$\alpha : \mathbf{M}_n \to \mathbf{M}_m$ が単位的 Schwarz 写像（つまり $\alpha(I_n) = I_m$ で $\alpha(X^*X) \geq \alpha(X)^*\alpha(X)$ を満たす線形写像）とすると，任意の可逆な密度行列 $\rho, \sigma \in \mathbf{M}_m$ と $X \in \mathbf{M}_n$ に対して

$$S_f^X(\alpha^*(\rho)\|\alpha^*(\sigma)) \leq S_f^{\alpha(X)}(\rho\|\sigma)$$

が成立する．

同時凸性． f が作用素凸とすると，任意の $X \in \mathbf{M}_n$ に対して，$S_f^X(\rho\|\sigma)$ は可逆な密度行列 ρ, σ の 2 変数について凸である．

上で，$(0,\infty)$ 上の実数値関数 f が**作用素単調**とは，任意の n と $A, B \in \mathbf{P}_n$ に対して，$A \geq B$ ならば $f(A) \geq f(B)$ であるときをいい，また $f(\lambda A + (1-\lambda)B) \leq \lambda f(A) + (1-\lambda)f(B)$ $(0 \leq \lambda \leq 1)$ であるとき f は**作用素凸**といわれる．$A, B \in \mathbf{P}_n$ に対しても擬エントロピー $S_f^X(A\|B)$ がそのまま定義できる．例えば，$0 \leq p \leq 1$ に対して，$f(x) = -x^p$ は $[0,\infty)$ 上で作用素凸であり，$-S_f^X(A\|B) = \mathrm{Tr}\, X^*A^pXB^{1-p}$ であるから，擬エントロピーの凸性は Lieb–Ando の凹性の拡張となっている．また，$f(x) = x\log x$ は $(0,\infty)$ 上で作用素凸であり，$X = I$ とすると，$S_f^I(A\|B)$ は通常の相対エントロピー $S(A\|B)$ になるから，相対エントロピーの凸性も含まれる．最近，擬エントロピーの凸性のエレガントな別証明が Hansen[13, 14] と Effros[8] によって与えられた．

3. Petz の単調計量

可逆な $n \times n$ 密度行列の全体 $\mathcal{D}_n$ は滑らかな多様体をなし，各点 $\rho \in \mathcal{D}_n$ における接空間は $\{A \in \mathbf{M}_n^{sa} : \mathrm{Tr}\, A = 0\}$ で与えられる．すべての n に対する $\mathcal{D}_n$ 上で定義された計量（正確には計量の列）$\gamma_\rho(\cdot,\cdot)$ $(\rho \in \mathcal{D}_n)$ は，トレースを保存する任意の完全正写像 $\beta : \mathbf{M}_n \to \mathbf{M}_m$ に対して

$$\gamma_{\beta(\rho)}(\beta(A), \beta(A)) \leq \gamma_\rho(A, A),$$
$$\rho \in \mathcal{D}_n,\ A \in \mathbf{M}_n^{sa},\ \mathrm{Tr}\, A = 0$$

を満たすとき，**単調計量**と呼ばれる．ここで線形写像 β が完全正とは，任意の k に対して $\beta \otimes \mathrm{id}_k : \mathbf{M}_n \otimes \mathbf{M}_k \to \mathbf{M}_m \otimes \mathbf{M}_k$ が正写像であるときをいう．1996 年に Petz[26] は，$\gamma_\rho(I, I) = \mathrm{Tr}\, \rho^{-1}$ を満たす単調計量 γ_ρ $(\rho \in \mathcal{D}_n)$ と，$f(1) = 1$ を満たす $[0,\infty)$ 上の対称 (i.e., $f(x) = xf(x^{-1})$ を満たす）な作用素単調関数 f との間に

$$\gamma_\rho(A, B) = \gamma_\rho^f(A, B)$$
$$:= \langle A, (f(\mathbf{L}_\rho \mathbf{R}_\rho^{-1})\mathbf{R}_\rho)^{-1} B\rangle_{\mathrm{HS}}$$

によって定まる 1 対 1 の対応があることを証明した．一般の $D \in \mathbf{P}_n$ と $X, Y \in \mathbf{M}_n$ に拡張した単調計量 $\gamma_D(X, Y)$ の完全な特徴付けは最近 Kumagai[20] によって与えられた．また Petz–Hasegawa は，WYD 歪情報量が作用素単調関数

$$f_p(x) := p(1-p)\frac{(x-1)^2}{(x^p-1)(x^{1-p}-1)}. \qquad (2)$$

を用いて

$$I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p, K) = \frac{f_p(0)}{2}\gamma_\rho^{f_p}(i[\rho, K], i[\rho, K])$$

と表されることを示した．(ただし Petz–Hasegawa では定数 $f_p(0)/2$ は確定しなかった．) 単調計量 γ_ρ に対して $\gamma_\rho(A, A)$ が (ρ, A) の 2 変数について凸であることが容易に示すことができるから，上の表示より $\rho \mapsto I_\rho^{\mathrm{WYD}}(p, K)$ の凸性が改めて証明されたことになる．Petz の単調計量は**量子 Fisher 情報量**とも呼ばれる．

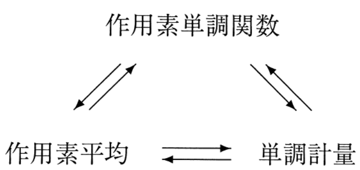
最近 Hansen[14] は WYD 歪情報量を一般の作用素単調関数に付随するものに拡張した．f が $[0,\infty)$ 上の対称な作用素単調関数で $f(1) = 1$ と

$f(0)>0$ を満たすとき，Hansen は密度行列 ρ とエルミート行列 K に対する **metric adjusted** **歪情報量**を

$$I_\rho^f(K) := \frac{f(0)}{2}\gamma_\rho^f(i[\rho,K], i[\rho,K])$$
$$= \frac{f(0)}{2}\langle[\rho,K], (f(\mathbf{L}_\rho\mathbf{R}_\rho^{-1})\mathbf{R}_\rho)^{-1}([\rho,K])\rangle_{\mathrm{HS}}$$

と定義した（彼から「metric adjusted」より「metrically adjusted」のほうが適切かもしれないと聞いた）．論文[5, 14]で，任意の $K\in\mathbf{M}_n^{sa}$ に対して $\rho\mapsto I_\rho^f(K)$ が凸関数であることが示された．

ところで，作用素論で有名な Kubo–Ando[19]の**作用素平均**の理論では，作用素平均と，$f(1)=1$ を満たす $[0,\infty)$ 上の作用素単調関数との間に 1 対 1 の対応がある．Petz の単調計量と作用素単調関数との 1 対 1 対応と合わせると



の 3 角形の対応関係が知られる．例えば，作用素単調関数 $(x+1)/2$ には算術平均と SLD（symmetric logarithmic derivative）計量，i.e., Bures–Uhlmann 計量

$$\left\langle A, \left(\frac{\mathbf{L}_\rho+\mathbf{R}_\rho}{2}\right)^{-1} B\right\rangle_{\mathrm{HS}}$$
$$= 2\int_0^\infty \mathrm{Tr}\, Ae^{-t\rho}Be^{-t\rho}\,dt$$

が対応し，関数 $(x-1)/\log x$ には対数平均と Bogoliubov（または Kubo–Mori）計量

$$\left\langle A, \left(\int_0^1 \mathbf{L}_\rho^s\mathbf{R}_\rho^{1-s}\,ds\right)^{-1} B\right\rangle_{\mathrm{HS}}$$
$$= \int_0^\infty \mathrm{Tr}\, A(\rho+tI)^{-1}B(\rho+tI)^{-1}\,dt$$

が対応する．また (2) の $f_{1/2}(x)=((\sqrt{x}+1)/2)^2$ に対応する計量は Wigner–Yanase 計量と呼ばれる．量子情報理論，量子情報幾何の研究では上記の 3 角形の対応関係に着目することが有用であると筆者は考える．

さらに Lesniewski–Ruskai[21]は，任意の単調計量 γ_ρ^f が擬エントロピー $S_g^I(\rho\|\sigma)$ のヘッシアン

$$\gamma_\rho^f(A,B) = \frac{\partial^2}{\partial t\partial s}S_g^I(\rho+tA\|\rho+tB)\Big|_{t=s=0}$$

で与えられることを示した．ここで f, g は

$$\frac{1}{f(x)} = \frac{g(x)+xg(x^{-1})}{(x-1)^2}$$

を満たすとする．上の関係式は Petz の単調計量と擬エントロピーの間の直接的な対応を与える．特に $f(x)=(x-1)/\log x$, $g(x)=x\log x$ の場合，Bogoliubov 計量が相対エントロピーのヘッシアンであるというよく知られた事実をいう．

■ 4. Carlen–Lieb の仕事 ■

Lieb の論文[22]で，$0<p\le 1$ のとき，任意の $X\in\mathbf{M}_n$ に対して $A\in\mathbf{M}_n^+\mapsto \mathrm{Tr}\,(X^*A^pX)^{1/p}$ が凹関数であるかという問題が出された．Epstein[9]は Lieb の論文の直後に，Pick/Herglotz 関数の積分表示を用いる複素解析的な方法でこれを証明し，また同じ方法で Lieb の凹性の別証明も与えた．1999 年に Carlen–Lieb[6]は関数

$$(A,B)\in\mathbf{M}_n^+\times\mathbf{M}_n^+\mapsto \mathrm{Tr}\,(A^p+B^p)^{1/p} \quad (3)$$

について，$0<p\le 1$ のとき同時凹であり，$p=2$ のとき同時凸であり，$p>2$ のとき同時凸でない（同時凹でもない）ことを示した．$p=2$ で同時凸で $p>2$ で同時凸でないことは Ando–Hiai[3]でも示された．ここで $0<p\le 1$ のときの凹性は，上記の Epstein の凹性から

$$\mathrm{Tr}\left(\begin{bmatrix} I & 0\\ I & 0\end{bmatrix}^*\begin{bmatrix} A & 0\\ 0 & B\end{bmatrix}^p\begin{bmatrix} I & 0\\ I & 0\end{bmatrix}\right)^{1/p}$$
$$= \mathrm{Tr}\,(A^p+B^p)^{1/p}$$

を用いて直ちに分かる．

上記論文[6]では $\mathrm{Tr}\,(A^p+B^p)^{1/p}$ の $1<p<2$ のときの同時凸性は未解決問題として残ったが，2008 年の続きの論文[7]で Carlen–Lieb はこれを解決した．彼らは，Epstein 型の関数

$$A\in\mathbf{M}_n^+\mapsto \mathrm{Tr}\,(X^*A^pX)^s$$

について，任意の $X\in\mathbf{M}_n$ に対して，$1\le p\le 2$,

$s \geq 1/p$ のとき凸，$0 \leq p \leq 1$, $1 \leq s \leq 1/p$ のとき凹，$p > 2$ のとき凸でも凹でもないことを示した．さらに

$$(A, B) \in \mathbf{M}_n^+ \times \mathbf{M}_n^+ \mapsto \left\{ \operatorname{Tr} (A^p + B^p)^{q/p} \right\}^{1/q}$$

について，$1 \leq p \leq 2$, $q \geq 1$ のとき同時凸，$0 \leq p \leq q \leq 1$ のとき同時凹, $p > 2, 0 < q \neq p$ のとき凸でも凹でもないことを示した．これは $q = 1$ として，上記の未解決問題の解決を含む．

関連して，2001 年に筆者[15)]は

$$(A, B) \in \mathbf{M}_n^+ \times \mathbf{M}_m^+ \longmapsto \operatorname{Tr} \left\{ \Phi(A^p)^{1/2} \Psi(B^q) \Phi(A^p)^{1/2} \right\}^s \quad (4)$$

などのトレース関数を考えた．ここで $\Phi : \mathbf{M}_n \to \mathbf{M}_k$, $\Psi : \mathbf{M}_m \to \mathbf{M}_k$ は正線形写像とする．$s = 1$ で $\Phi(\cdot) = X^* \cdot X$ とすれば，(4) は Lieb–Ando の凹凸性の関数 (1) を特別の場合として含む．論文[15)]で Epstein の方法を改良して，$p, q, s > 0$ の適当な条件の下で，関数 (4) が任意の Φ, Ψ に対して同時凹であることを示した．p, q, s に負の値も許して，(4) が同時凹あるいは同時凸になるための p, q, s の必要十分条件を求める問題は面白い．

5. Wigner–Yanase 歪情報量と不確定性原理に関連する不等式

エルミート行列 A, B と密度行列 ρ に対する**共分散**は

$$\operatorname{Cov}_\rho(A, B) := \operatorname{Tr} \rho AB - (\operatorname{Tr} \rho A)(\operatorname{Tr} \rho B)$$

と定義される．Luo–Zhang[23)]は **Wigner–Yanase 相関**を

$$\operatorname{Corr}_\rho(A, B) := \operatorname{Tr} \rho AB - \operatorname{Tr} \rho^{1/2} A \rho^{1/2} B$$

により導入した．$A = B$ の場合, これらはそれぞれ分散と Wigner–Yanase 歪情報量に一致する．つまり $\operatorname{Cov}_\rho(A, A) = \operatorname{Var}_\rho(A) := \operatorname{Tr} \rho A^2 - (\operatorname{Tr} \rho A)^2$, $\operatorname{Corr}_\rho(A, A) = I_\rho^{\mathrm{WY}}(A)$.

Heisenberg の不確定性関係は

$$\operatorname{Var}_\rho(A) \cdot \operatorname{Var}_\rho(B) \geq \frac{1}{4} |\operatorname{Tr} \rho [A, B]|^2 \quad (5)$$

であり，もっと強い不等式

$$\begin{aligned} &\operatorname{Var}_\rho(A) \cdot \operatorname{Var}_\rho(B) \\ &- \frac{1}{4} |\operatorname{Cov}_\rho(A, B) + \operatorname{Cov}_\rho(B, A)|^2 \\ &\geq \frac{1}{4} |\operatorname{Tr} \rho [A, B]|^2 \end{aligned} \quad (6)$$

は **Schrödinger の不確定性関係**と呼ばれる．行列に対する不確定性関係 (5), (6) は Schwarz の不等式を使えば簡単に導出できる．実際，$\mathbf{M}_n$ 上の双線形汎関数を

$$\langle X, Y \rangle_\rho := \operatorname{Tr} \rho X^* Y - \overline{(\operatorname{Tr} \rho X)} (\operatorname{Tr} \rho Y)$$

と定める．$(X, Y) \mapsto \operatorname{Tr} \rho X^* Y$ に Schwarz の不等式を用いて

$$\begin{aligned} |\operatorname{Tr} \rho X|^2 &= |\operatorname{Tr} \rho I X|^2 \\ &\leq (\operatorname{Tr} \rho I)(\operatorname{Tr} \rho X^* X) = \operatorname{Tr} \rho X^* X \end{aligned}$$

であるから，$\langle \cdot, \cdot \rangle_\rho$ は非負定値である．したがって Schwarz の不等式より，$A, B \in \mathbf{M}_n^{sa}$ に対して $|\langle A, B \rangle_\rho|^2 \leq \langle A, A \rangle_\rho \langle B, B \rangle_\rho$．ここで

$$\langle A, A \rangle_\rho = \operatorname{Var}_\rho(A), \quad \langle B, B \rangle_\rho = \operatorname{Var}_\rho(B),$$

$$\langle A, B \rangle_\rho = \operatorname{Cov}_\rho(A, B).$$

さらに $\operatorname{Cov}_\rho(A, B)$ の実部と虚部は

$$\frac{1}{2} \big(\operatorname{Cov}_\rho(A, B) + \operatorname{Cov}_\rho(B, A) \big),$$
$$\frac{1}{2i} \big(\operatorname{Cov}_\rho(A, B) - \operatorname{Cov}_\rho(B, A) \big) = \frac{1}{2i} \operatorname{Tr} \rho [A, B]$$

であるから，

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} |\operatorname{Cov}_\rho(A, B) + \operatorname{Cov}_\rho(B, A)|^2 + \frac{1}{4} |\operatorname{Tr} \rho [A, B]|^2 \\ &\leq \operatorname{Var}_\rho(A) \cdot \operatorname{Var}_\rho(B). \end{aligned}$$

よって (6) が成立する．

Luo–Zhang[23)]は

$$\operatorname{Var}_\rho(A) \geq I_\rho^{\mathrm{WY}}(A) \quad (7)$$

に注意して，(5) より強い $I_\rho^{\mathrm{WY}}(A) \cdot I_\rho^{\mathrm{WY}}(B) \geq \frac{1}{4} |\operatorname{Tr} \rho [A, B]|^2$ を考えたが，これは成立しない (Kosaki[18)]による)．さらに論文[23)]で不等式

$$\begin{aligned} &\operatorname{Var}_\rho(A) \cdot \operatorname{Var}_\rho(B) \\ &- \frac{1}{4} |\operatorname{Cov}_\rho(A, B) + \operatorname{Cov}_\rho(B, A)|^2 \\ &\geq I_\rho^{\mathrm{WY}}(A) \cdot I_\rho^{\mathrm{WY}}(B) \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{4}|\mathrm{Corr}_\rho(A,B)+\mathrm{Corr}_\rho(B,A)|^2 \qquad (8)$$

が予想された．Kosaki[18]と Yanagi–Furuichi–Kuriyama[29]は独立に，上の右辺が WYD 歪情報量に対応するもっと一般の場合でこれを証明した．Gibilisco–Imparato–Isola[11]は右辺が一般の作用素単調関数で定義される量子 Fisher 情報量に対応する場合に拡張した．Gibilisco–Imparato–Isola[12]と Andai[1]はさらに N 個のエルミート行列の場合に拡張した不等式

$$\det\Big[\mathrm{Cov}_\rho(A_i,A_j)\Big]_{i,j=1}^N \ge \det\left[\frac{f(0)}{2}\,\gamma_\rho^f(i[\rho,A_i],i[\rho,A_j])\right]_{i,j=1}^N$$

を示した．これの簡単な証明が Gibilisco–Hiai–Petz[10]にある．f が (2) の $f_{1/2}$ で $N=1$ の場合が (7) であり，$N=2$ の場合が (8) である．

参考文献

1) A. Andai, Uncertainty principle with quantum Fisher information, *J. Math. Phys.* **49** (2008), 012106.
2) T. Ando, Concavity of certain maps on positive definite matrices and applications to Hadamard Products, *Linear Algebra Appl.* **26** (1979), 203–241.
3) T. Ando and F. Hiai, Hölder type inequalities for matrices, *Math. Ineq. Appl.* **1** (1998), 1–30.
4) H. Araki, Relative entropy of states of von Neumann algebras I, II, *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **11** (1976), 809–833; **13** (1977), 173–192.
5) L. Cai and F. Hansen, Metric adjusted skew information: Convexity and restricted forms of superadditivity, *Lett. Math. Phys.* **93** (2010), 1–13.
6) E.A. Carlen and E.H. Lieb, A Minkowski type trace inequality and strong subadditivity of quantum entropy, *Advances in the Mathematical Sciences, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2* **189** (1999), 59–68.
7) E.A. Carlen and E.H. Lieb, A Minkowski type trace inequality and strong subadditivity of quantum entropy II: Convexity and concavity, *Lett. Math. Phys.* **83** (2008), 107–126.
8) E.G. Effros, A matrix convexity approach to some celebrated quantum inequalities, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **106** (2009), 1006–1008.
9) H. Epstein, Remarks on two theorems of E. Lieb, *Comm. Math. Phys.* **31** (1973), 317–325.
10) P. Gibilisco, F. Hiai and D. Petz, Quantum covariance, quantum Fisher information and the uncertainty principle, *IEEE Trans. Inform. Theory* **55** (2009), 439–443.
11) P. Gibilisco, D. Imparato and T. Isola, Uncertainty principle and quantum Fisher information. II, *J. Math. Phys.* **48** (2007), 072109.
12) P. Gibilisco, D. Imparato and T. Isola, A Robertson-type uncertainty principle and quantum Fisher information, *Linear Algebra Appl.* **428** (2008), 1706–1724.
13) F. Hansen, Extensions of Lieb's concavity theorem, *J. Stat. Phys.* **124** (2006), 87–101.
14) F. Hansen, Metric adjusted skew information, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **105** (2008), 9909–9916.
15) F. Hiai, Concavity of certain matrix trace functions, *Taiwanese J. Math.* **5** (2001), 535–554.
16) H. Kosaki, Interpolation theory and the Wigner-Yanase-Dyson-Lieb concavity, *Comm. Math. Phys.* **87** (1982), 315–329.
17) H. Kosaki, Relative entropy of states: a variational expression, *J. Operator Theory* **16** (1986), 335–348.
18) H. Kosaki, Matrix trace inequality related to uncertainty principle, *Internat. J. Math.* **16** (2005), 629–645.
19) F. Kubo and T. Ando, Means of positive linear operator, *Math. Ann.* **246** (1980), 205–224.
20) W. Kumagai, A characterization of extended monotone metrics, *Linear Algebra Appl.* **434** (2011), 224–231.
21) A. Lesniewski and M.B. Ruskai, Monotone Riemannian metrics and relative entropy on noncommutative probability spaces, *J. Math. Phys.* **40** (1999), 5702–5724.
22) E.H. Lieb, Convex trace functions and the Wigner-Yanase-Dyson conjecture, *Advances in Math.* **11** (1973), 267–288.
23) S. Luo and Z. Zhang, An information characterization of Schrödinger's uncertainty principle, *J. Stat. Phys.* **114** (2004), 1557–1576.
24) D. Petz, Quasi-entropies for states of a von Neumann algebra, *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **21** (1985), 787–800.
25) D. Petz, Quasi-entropies for finite quantum systems, *Rep. Math. Phys.* **23** (1986), 57–65.
26) D. Petz, Monotone metrics on matrix spaces, *Linear Algebra Appl.* **244** (1996), 81–96.
27) H. Umegaki, Conditional expectation in an operator algebra, IV (entropy and information), *Kōdai Math. Sem. Rep.* **14** (1962), 59–85.
28) E.P. Wigner and M.M. Yanase, Information contents of distributions, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **49** (1963), 910–918.
29) K. Yanagi, S. Furuichi and K. Kuriyama, A generalized skew information and uncertainty relation, *IEEE Trans. Inform. Theory* **51** (2005), 4401–4404.

（ひあい・ふみお，東北大学大学院情報科学研究科）

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

溝口 文雄

1982年4月号

30年前の数理科学特集は“第五世代計算機”でした．その特集の中で私が担当したのは，“知識ベースの構築と展開方法”というテーマでした．知識ベースというのは，単なる事実としてのデータの集合ではなく，ある事実に加わった経験的なものが知識であり，専門家の持つルールと言えるものです．その当時，筆者が対象としていた眼科学の緑内障という疾患を診断するルールを使用していました．このルールは人間の医師との協同作業から得られて，それを利用すると，専門家に近い診断をするシステムを作ることができると考えて，システムの開発をしていました．その当時の，ハードウェアの性能は，現在の携帯電話にも及んでいなかったのです．人間並みの知識ベースを持ち人間を超えたのは，最近の話題の，IBMが開発したWatsonというクイズを対象にしたものです．使用されているのは，スーパーコンピュータです．推論をすることを目標とした第五世代コンピュータのタイプではないのです．Watsonの特徴は自然言語の質問を内容的に理解して，しかも，理解した内容への正しさを確信している点です．そのように確信しないと質問回答のボタンを人間よりも早く押せないのです．早く押さないとクイズに答えることができないのです．30年前の知識ベースは，人間を超えることを目的としたのではなく，それを利用することでした．実際Watsonのシステム設計には，IBMの研究者たちが総力を挙げて進めていったと思われます．IBMのスーパーコンピュータによる開発は，多くの技術者によるものであり，その目的は，人間を超えることでコンピュータの性能を大きく宣伝するというもので，第五世代コンピュータの開発のような，夢への挑戦ではないと考えられます．30年前の開発当時とは状況が大きく変わったことに気づきます．チェスの天才カスパロスを負かしたIBMのコンピュータは，サーバーとしての性能を誇るためのものであり，Watsonにしても，IBMのスーパーコンピュータの素晴らしさを宣伝するものです．スーパーコンピュータのベンチマークを早く解くだけで世界一になっただけでなく人間を超える，クイズの知識ベースを開発したので，より現実的な性能を我々に示したと言えます．携帯電話でも，専門的な知識を使う仕組みを使い，以前に開発した緑内障のエキスパートシステムを作ることが現在可能になって来ています．



参考文献

1) 溝口文雄著『携帯電話は人工知能の夢を見るか？―計算機械から知識活用システムへ』オーム社，平成21年11月25日発行．

（みぞぐち・ふみお，東京理科大学名誉教授）

ゲルマン

クォークの創始者

原　康夫

1. はじめに

マレー・ゲルマン（Murray Gell-Mann, 1929～）は，物質構造の基本粒子であるクォークの創始者として知られている．全世界の大学で学生実験としてくり返し行われてきた「ミリカンの実験」によって，電荷の測定値は電気素量 e の整数倍であることが確かめられてきたのに，電気素量の 2/3 倍や −1/3 倍という半端な大きさの電荷をもつクォークを提唱したことは，きわめて大胆であった．

クォークは不思議な存在である．現在，クォークは素粒子の標準模型の主要な構成メンバーであるが，現在に至るまで単独のクォークは発見されていない．しかし，実験によれば陽子と中性子の中には半端な電荷を帯びた 3 個のクォークが存在し，素粒子の標準模型では，3 種類の色を帯びたクォークが 8 種類の色を帯びたゲージボソンであるグルオンの仲立ちする力によって陽子や中性子の中に閉じ込められ，単独のクォークは取り出せないと考えられている．このように不思議なクォークを提唱したゲルマンの思考について検討したい．

さて，私がゲルマンに初めて会ったのは，カリフォルニア工科大学のゲルマン研究室の研究員に採用されて渡米した 1963 年 9 月のことであった．自己紹介すると，「どこの大学からきたのか」と質問され，「Tokyo University of Education（東京教育大学）のトモナガ（朝永）のグループからだ」と答えたところ，「おお Tokyo Bunrika Daigaku（東京文理科大学）か．私は，トモナガの中間結合理論を勉強した」とのことだった．ゲルマンがクォークを提唱した論文を完成したのはこの出会いの 4 カ月後であった．その年の 5 人の研究員の中には，ゲルマンとともにクォーク模型の基礎になった八道説の独立な発見者であったネエマンもいて，5 人は同じ部屋で研究した．

クォークを提唱した論文の発表直後には，八道説を確立したオメガ・マイナス粒子の発見があり，1964 年の春学期には Seminar on Strong and Weak Interaction という題名の週 2 回の講義で，ゲルマンが八道説とクォーク模型について話すのを聞いた．

2. 坂田模型と $U(3)$ 対称模型[1)]

素粒子物理学は，素粒子とその相互作用について研究する学問である．1930 年代の前半に知られていた素粒子は，電子，陽子，中性子と光子であったが，パウリがベータ崩壊ではニュートリノが放出されることを予言し，湯川が核力を仲介するパイメソンを提唱し，素粒子の相互作用には，電磁相互作用と強い相互作用と弱い相互作用があり，こ

れらの相互作用では，バリオン数（核子数）と電荷が保存することがわかった．なお．強い相互作用をする粒子をハドロン，強い相互作用はしないが弱い相互作用をする粒子をレプトンと総称し，バリオン数が1のハドロンをバリオン，バリオン数が0のハドロンをメソンという．

1950年前後から，宇宙線の中に予期されていなかったハドロンが発見されはじめ，高エネルギー加速器の完成に伴い，さらに多くの新しいハドロンが生成されるようになった．これらの新しいハドロンの生成反応と崩壊反応の研究に基づいて，ハドロンは強い相互作用と電磁相互作用では保存するが弱い相互作用では保存しない新しい保存量を帯びていることが，1953年に中野と西島およびゲルマンによって，日米で独立に発見された．新しい保存量の呼び名としては，ゲルマンが命名したストレンジネス（奇妙さ）が定着した*1)．

1955年に坂田は，強い相互作用で保存される3つの保存量の存在は3種類の基本粒子の存在を意味すると考え，基本粒子として陽子pと中性子nと新粒子の1つのラムダ粒子Λを選び，すべてのハドロンはp, n, Λとそれらの反粒子から構成された複合体だとする坂田模型を提唱した．

1959年に池田，小川と大貫および独立に山口は，坂田模型の3種類の基本粒子の同質性を$U(3)$群を使って定式化した．基本粒子の相互作用が$U(3)$対称性をもてば，基本粒子から構成されるハドロンは$U(3)$群の表現に対応する多重項をつくる．ただし，Λはpとnより重いので$U(3)$対称性は破れた対称性である．

この$U(3)$対称模型は8重項と1重項をつくるメソンを見事に説明したが，1960年頃になると，バリオンについては，8重項をつくっていると思われる質量の近い8個のバリオンの中のp, n, Λを3重項だとしているのは不自然であったし，核子（陽子と中性子）と反核子が結合して質量がきわめて軽いパイメソンになることは理論的に困難だと思われるようになった．

*1)　ゲルマンからの私信（1971年）によれば，strangenessはただwonderment（驚き）を表す言葉だとのことである．

3. 八道説（$SU(3)/Z_3$ 対称模型）の提唱

そこで1961年にゲルマンとネエマンは独立に，ハドロンの強い相互作用は破れた$SU(3)$対称性をもつが，p, n, Λを含むバリオンの基底状態もメソンの基底状態と同じように破れた$SU(3)$群の8重項だと提唱した．ゲルマンはこの8重項模型をeightfold way（釈迦が説いた苦しみから脱却するための8つの正しい道）とよんだので，八道説と訳されている．

八道説とは，基本粒子が何であるかは考えず，ハドロンの多重項は$SU(3)$群の既約表現に対応するが，$SU(3)$群の基本表現（3と記す）や反基本表現（3*と記す）に対応する多重項は存在せず，$3 \times 3 \times 3 = 1 + 8 + 8 + 10$や$3 \times 3^* = 1 + 8$のように，基本表現3の3の倍数個の積表現だけが存在できるとする現象論である（3*は3が-1個と数える），そこで，ネエマンは八道説を$SU(3)/Z_3$対称模型とよんでいた．

八道説に基づくハドロンの質量公式が，ゲルマンと大久保によって独立に提案され，実験とよく一致することが確かめられたので，八道説は注目を集めた．

ハドロンのスペクトルの説明などに八道説が成功した事実は，ハドロンが複合粒子であることを示唆するが，ハドロンの中には基本粒子の候補が見当たらないので，「ハドロンを構成する基本粒子は存在せず，ハドロンの間で交換されるハドロンが仲立ちする力がハドロンを安定に存在させる，つまりハドロンはハドロンによるハドロンの複合粒子である」というブートストラップ（長靴のひも）理論がチューによって提唱され，すべてのハドロンは平等であるという核民主主義として人気を集めた．具体的には，ハドロンの理論は観測可能量であるS行列（散乱行列）だけで表されるべきであり，S行列は分散公式とユニタリー関係から自己無撞着に導かれるというアイディアに基づいている．したがって，八道説の破れた$SU(3)/Z_3$対称性も自己無撞着に導かれると期待する人たち

がいた[*2)].

4. クォーク模型の提唱

ゲルマンがクォーク模型を提唱した短い論文“バリオンとメソンの体系的（schematic）模型”が，欧州のレター誌 *Physics Letters* に投稿されたのは1964年1月4日で，刊行されたのは2月1日であった[2)]．内容を紹介しよう．

まず「バリオンとメソンの強い相互作用が八道説で正しく記述されるとすると，この状況に対する根本的説明を探したくなる」という文章で始まる．次に，ブートストラップ理論の可能性もあるが,「ハドロンの電磁相互作用や弱い相互作用を考える場合には，ハドロンを構成する基本粒子の場の理論モデルが有用である」ことを指摘して，基本粒子を探ることにする．

さて，八道説でのすべてのハドロンは，$SU(3)$ 群の8次元表現の積（$8\times 8,\cdots$）に含まれる表現に対応する多重項に分類される．そこで，基本粒子は8重項である可能性がある．しかし,「基本粒子が8重項であれば，対称群は $SU(8)$ だと思われる．したがって，基本粒子として $SU(3)$ 群の基本表現3に対応する3重項を試してみたくなる」と記して，導入部を終わる．

基底状態のバリオンの8重項を，基本表現3の3個の積 $3\times 3\times 3=1+8+8+10$ に含まれる8次元表現に対応させるのが単純で優雅である．そこで，基本粒子は，バリオン数が1/3で，電荷が $(2/3)e$ か $-(1/3)e$ の3種類のスピン1/2粒子の3重項であることが導かれる．これらを $u^{2/3}, d^{-1/3}, s^{-1/3}$ と記し，ジェームズ・ジョイスの「フィネガンの徹夜祭」の文章 Three quarks for Muster Mark! を引用してクォーク（記号 q）とよび，クォークの反粒子を反クォークとよぶ（記号 $\overline{q}$）[*3)]．

続いて,「クォーク模型では，バリオンとして一番簡単な qqq 状態は，$3\times 3\times 3=1+8+8+10$ なので，観測されている1重項，8重項，10重項だけを含み，メソンとして一番簡単な $q\overline{q}$ 状態は，$3\times 3^*=1+8$ なので，観測されている1重項と8重項だけを含むが，これは著しいことである」と強調する．

クォークを仮定すると他にもメリットはあるのだろうか．ゲルマンは,「3重項のクォーク場が1重項のベクトル場と強い相互作用をする場の理論模型を考え，クォーク場で表した電荷と弱荷の演算子を作ると，それらの同時交換関係を具体的に導くことができ，これらの交換関係の行列要素から電流と弱流の行列要素に対する一連の分散関係が導かれ，弱流のすべての行列要素を求めることができるだろう」というシナリオを簡単に記す．

続いて「クォークが,（質量無限大の極限での数学的な存在ではなく），有限な質量をもつ物理的な粒子であれば，どのような振る舞いをするか推測するのは楽しい」と書いている．

ゲルマンはクォークを物理的な粒子と考えたのだろうか，それとも数学的存在と考えたのだろうか．4カ月後に完成した別の論文の「3重項，実在するものか，数学的なものか」という節で，数学的なものという意味を，クォーク場を含む簡単な模型で八道説の代数関係を抽出して，クォーク場の模型を捨て去る例を挙げ，この手法はフランス料理のシェフが，雉を2枚の子牛の肉で挟んで料理し，出来上がると子牛の肉を取り去ってしまうのに例えている[4)]．

最後に「$u^{2/3}$ または $d^{-1/3}$ は安定なので，高エネルギー宇宙線によって照射された地表は安定なクォークを含んでいるだろう．しかし，含有量は僅かなので検出できないと評価される．そこで，高エネルギー加速器を使って，電荷が $-1/3$ あるいは2/3の安定なクォークを探せば，有限の質量をもつ物理的な粒子としてのクォークが存在しないことを再確認することの助けになるだろう」と書いて終わっている．この文章は,「これまで半端な電荷をもつ粒子は観測されていない．これからも安定なクォークは観測されそうもない」という

---

*2）1964年5月にダッシェン，フラウチ，ゲルマンと筆者は，ゲルマン–大久保の質量公式が成り立つ理由を，8重項の行列要素のブートストラップ理論での力学的増幅によるとする論文を書いた．

*3）カモメの鳴き声を意味するクォークという名前をつけた経緯については文献3）に記されている．

意味の文章だと私は考える．

ゲルマンがこの論文を米国物理学会のレター誌 *Physical Review Letters* に投稿しなかった理由は，受理されないと判断したためだと考えられる．Quarkという物理用語としては奇妙な名前に対する編集者の強い反対も予想しただろう．

5. ツヴァイクのエース模型

ハドロンは半端な電荷を帯びた $SU(3)$ 群の3重項の基本粒子から構成されているというアイディアをゲルマンとは独立にほぼ同時に発表したのが，カリフォルニア工科大の大学院学生だったツヴァイクである．彼は欧州原子核研究機関 CERN に滞在中の1964年1月に「強い相互作用の対称性とその破れの SU_3 模型 I, II」という合計100頁以上の長い論文を執筆し，CERNのプレプリントとして発表したが[5]，CERNの理論部長は米国物理学会の雑誌 *Physical Review* への投稿を許可しなかったので，学術雑誌には掲載されていない．

ツヴァイクは半端な電荷をもつ基本粒子をエース ace と名づけた．その理由は，当時4種類発見されていたレプトンに対応して，ハドロンを構成する基本粒子も将来は4種類発見されると予想して，トランプの4種類のエースに対応させたとのことである．

ツヴァイクは，ハドロンは3種類のエースとその反粒子から構成されていて，相互作用は $SU(3)$ 対称性を満たし，$SU(3)$ 対称性は重いエースと軽い2重項のエースの質量差によって破れ，さらに後にツヴァイクの規則とよばれるようになる規則を利用すると，多くのハドロン現象の関係が導かれ，実験結果と合うことを示した．

単独のエースの観測可能性については，アブストラクトで「エースの実験的な探求が示唆される」，序論で「エースは $SU(3)$ 対称性を表現する便利な方法を提供するに過ぎない架空のものかもしれないが，その実験的探求は明らかに価値があると思われる」と記しているだけで，ゲルマンとは異なり，半端な電荷の粒子が観測されていない事実を悩んでいない．

6. クォーク模型の発展

ゲルマンは「クォークが有限な質量をもつ物理的な粒子であれば，どのような振る舞いをするか推測するのは楽しい」と書いた．クォーク模型が注目を浴びたのは，約半年後にハドロンの中で軽いクォークがゆっくり（非相対論的に）運動していると考えると，実験で観測されているすべての軽いハドロンのスペクトルが定性的に説明できるばかりでなく，陽子と中性子の磁気モーメントの比が3対 -2 になるという驚くべき結果をギュルセイとラディカッティ，崎田をはじめとする何人かの研究者が報告したからであった．ハドロンの中で質量が陽子の質量の1/3程度の軽いクォークがゆっくり動いているとすると，ハドロンに衝撃を与えれば，常識的には，クォークが飛び出してくるはずである．しかし，クォーク模型が提唱されたあとでは，他の研究者は，「クォーク模型でこういう計算をすれば，こういう結果が出る」と自由に発表できたのであった．

しかし，上記の結論を導くには，バリオンの中の3個のクォークの波動関数は，クォークの入れ替えで完全対称であると仮定する必要がある．この仮定は，スピンが1/2のクォークはフェルミオンなので入れ替えで反対称だというパウリ原理と矛盾する．この矛盾は，クォークは色（color）の自由度をもち，この自由度が $SU(3)$ 対称性をもち［$SU_c(3)$ と記す］，クォークは $SU_c(3)$ の3重項で，u, d, s クォークのそれぞれが，赤，緑，青の3種類の色荷を帯び，すべてのハドロンは $SU_c(3)$ の1重項に限るとすれば解決することがわかった．

このようにして，3色のクォークがハドロンの中で自由に運動していると仮定すると，ハドロンの性質は定性的に理解できることがわかった．

単独のクォークは発見されないが，半端な電荷をもつクォークが陽子の中に閉じ込められていることは1968年に米国のスタンフォード線形加速器センターで行われた陽子による電子の大角度散乱の分析によってわかった．

このように振る舞うクォークの間に作用する力

は，近距離では弱く，遠距離では限りなく強くなっていく必要がある．この性質をもつ理論として，局所的な $SU_c(3)$ 対称性をもつクォークとグルオンのゲージ理論である量子色力学が定式化された．

量子色力学では，クォークはハドロンの中に閉じ込められ，$SU_c(3)$ 群の 1 重項のハドロンだけが現れ，ハドロンの質量スペクトルが再現されることは，連続な時空を格子化した格子量子色力学のコンピュータ・シミュレーションによって示されている．

ゲルマンが 3 色つきのクォーク模型と量子色力学の定式化に重要な貢献を行ったことは，色と量子色力学 quantum chromodynamics の命名者である事実からも推測できるだろう．

ところで，クォークの閉じ込め機構が理解された頃に c（チャーム）クォークが発見され，その後 b（ボトム）クォークと t（トップ）クォークが発見され，全部で 6 種類のクォークが存在することがわかった．3 種類のクォークの提案の原動力だった八道説，つまり破れた $SU(3)$ 対称性は，ハドロンに特有なエネルギースケールより小さな質量をもつ 3 種類のクォークが存在する事実から生じた現象にすぎないことがわかった．

7. 創始者の思考に学ぶ

ハドロンのもつ新しい量子数であるストレンジネスの発見に始まり，ハドロン現象の示す破れた $SU(3)/Z_3$ 対称性の発見を経て，ハドロンの基本粒子であるクォークを提唱し，クォークの従う力学である量子色力学の定式化にいたるまでの，ゲルマンの一連の研究成果は素晴らしく驚くべきである．これらの成果を生んだゲルマンの思考から何を学ぶべきだろうか．

半端な電荷をもつクォークの存在を大胆に提唱したこと，そして，半端な電荷をもつ粒子が発見されていない状況を考慮して，クォークは「物理的な粒子か数学的存在か」と考え続けたことを私は高く評価したい．この思考過程を「ゲルマンはクォークを物理的な粒子と考えていなかった」と見なす人が多い．しかし，物理的な粒子とみなしたか数学的存在とみなしたかという単純な 2 者択一的見方でゲルマンの思考を追及しても学ぶべきことは少ない．そもそも 1960 年代の理論物理学には，「ハドロンの中に閉じ込められていて外には単独で取り出せない物理的な粒子」という概念は存在しなかったのである．

私は，ゲルマンの思考に学ぶべき点として，物理学には現象論と本質論があることを念頭に置き，現象論的な constituent quark と本質論的な current quark の 2 種類を区別したことを挙げたい[6]．

現象論的な constituent quark とは，ハドロンの構成物としてハドロンの中で非相対論的に運動しているように見えるクォークである．現象論的なクォークの独立粒子模型がハドロン現象の定性的説明に成功したので，クォーク模型は大きな注目を引いた．第 4 のクォークが発見された 1974 年以降も constituent quark は有用な概念で，例えば，プサイ粒子のレベル構造を眺めたときに，ポテンシャル中の重いクォークと反クォークを想像しない物理学者はいないだろう．ゲルマンは constituent quark の例としてツヴァイクのエースを挙げている[6]．

本質論的な current quark とは，ハドロンを記述する本質論である量子色力学に現れるクォークの量子場を指すが，量子色力学の完成前は，クォークの場の理論模型に現れるクォーク場，あるいは電子やニュートリノなどのレプトンを使ってハドロンを探ったときに調べられるクォークを指したと考えればよい．

現象論的な constituent quark の研究はクォークの本質の探究に重要な役割を果たした．代表例として色の自由度の発見がある．ゲルマンは，不十分な実験事実の中から，ストレンジネスという新しい量子数を見つけ，八道説を提唱するなどの現象論の達人であったが，constituent quark にはあまり関心を持たず，現象の中に潜む本質の研究に専念した．具体的には，ゲルマンは簡単な場の理論モデルから，本質論でも成り立つと考えられ，実験でテストできる和則を導いて理論の正しさを確かめる試みなどを行った．現象論に満足せ

ず，試行錯誤しつつ本質論を探り続けたゲルマンの研究方法には学ぶべきことが多い．

ツヴァイクによれば，「ゲルマンの考えは，科学は社会的営為であり，社会は他人の研究に影響を与える個人を評価する．ゲルマンは現実の記述，実験でテストすることができる予言，他人が洞察力で拡張可能な理論的な枠組みの提供に関心をもってきた」のであった[7]．

参考文献

1) 坂田模型については，亀淵迪，「数理科学」No.**578**, 2011年9月号 p.72 を参照.
2) M. Gell-Mann, *Physics Letters* Vol.**8**, No.3, p.214 (1964).
3) マレー・ゲルマン，『クォークとジャガー たゆみなく進化する複雑系』，野本陽代訳（草思社，1997年）.
4) M. Gell-Mann, *Physics* Vol.**1**, p.63 (1964).
5) G. Zweig, An SU_3 Model for Strong Interaction Symmetry and Its Breaking I, II, CERN Preprint 8182/TH402 (1964/1/17) & 8419/TH412 (1964/2/21).
6) M. Gell-Mann, *Acta Physica Austriaca*, Supple. IX, 733 (1972).
7) G. Zweig, Memories of Murray and the Quark Model (2010/6/30). 2010年にシンガポールで開かれたゲルマンの満80歳記念シンポジュームで行われたゲルマンを前にしてのツヴァイクの講演原稿である．公式の場で，大学院時代の先生をファーストネームでよべるのはすばらしい．

（はら・やすお，筑波大学名誉教授）

情報幾何の新展開
脳と情報の数理科学

第13回

統計的推論の高次漸近理論 (2)

曲指数型分布族における推論と曲率の役割

甘利 俊一

前回に続き今回と次回で，統計的推論の高次漸近理論を述べる．観測数 N が大きいとき，統計学の推論はモデルによらずに共通の議論ができる．これは，分布の空間の言葉で言えば，接空間を用いた線形空間で議論ができるからである．N が大きいとはいえ，無限ではないとしてより精密な評価を行う理論が高次漸近理論であり，1970 年代後半から 80 年代にかけて，理論が世界的に完成していった．ここで示すのは Efron に始まる幾何学的理論である．接空間を超えてその隣まで考えるには，接続が必要になり曲率が役割を果たす．ただ，計算はいやになるほど面倒なので，ここでは方針のみを示す．気分を味わっていただければそれで良い．

13.1 Fisher 情報量と Cramér–Rao の定理

Fisher 情報行列は統計学の基本的な量である．平たく言えば，分布 $p(x,\boldsymbol{\xi})$ から出た観測値を用いて，パラメータ $\boldsymbol{\xi}$ についての統計的な推論を行うときに，一回の観測が与える平均の情報量を表すと考えられる．この考えは Fisher に由来する．Rao は 1945 年にこの考えを定式化し，有名な Crámer–Rao の定理を発表した*1)．

少し遅くなったが，推論の高次漸近理論に入る前に，Crámer–Rao の定理を述べておこう．詳しくは統計学の教科書に譲るが，少しだけ準備をしよう．

Fisher 情報量の加法性： x, y を独立な確率変数とし，その同時確率分布を

$$p(x,y,\boldsymbol{\xi}) = p(x,\boldsymbol{\xi})p(y,\boldsymbol{\xi}) \tag{13.1}$$

*1) これはカルカッタの地方数学誌[5)]に 1945 年に発表された．有名なアメリカの数学者 Crámer は，この定理を 1946 年の著書で発表している．Rao は弱冠 24 歳，インドの名もなき研究者であった．

とする．このときデータ (x, y) の持つ Fisher 情報量

$$g_{ij}^{XY}(\boldsymbol{\xi}) = E\left[\partial_i \log p(x, y, \boldsymbol{\xi})\partial_j \log p(x, y; \boldsymbol{\xi})\right] \tag{13.2}$$

は x, y それぞれの持つ Fisher 情報量 g_{ij}^X と g_{ij}^Y の和である，

$$g_{ij}^{XY}(\boldsymbol{\xi}) = g_{ij}^X(\boldsymbol{\xi}) + g_{ij}^Y(\boldsymbol{\xi}). \tag{13.3}$$

したがって，同じ分布から N 個の独立な観測データ $x_1, \cdots, x_N$ が得られたときの全体の情報量は，1 個のデータの情報量の N 倍

$$g_{ij}^{X_1 \cdots X_N}(\boldsymbol{\xi}) = N g_{ij}(\boldsymbol{\xi}) \tag{13.4}$$

である．T_{ijk} も同じく N 倍になるから，幾何が全体として N 倍にふくらむと考えればよい．

データ $x_1, \cdots, x_N$ から得られる推定量 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ とは，これらをもとに $\boldsymbol{\xi}$ の真の値を推定する量である．$\hat{\boldsymbol{\xi}}$ は $x_1, \cdots, x_N$ の関数であるから，これらに依存する確率変数である．これが

$$E\left[\hat{\boldsymbol{\xi}}\right] = \boldsymbol{\xi} \tag{13.5}$$

を満たすとき，$\hat{\boldsymbol{\xi}}$ を $\boldsymbol{\xi}$ の不偏推定量という．また，観測数 N が大きいときに推定の偏り (13.5) が 0 になるならば，これは漸近的に不変であるという．さらに，推定量が $N \to \infty$ で真の値 $\boldsymbol{\xi}$ に確率収束するとき，これを一致推定量という．

Crámer–Rao の定理：$\hat{\boldsymbol{\xi}}$ を不偏推定量とする．このとき，推定誤差の行列 $E = (e_{ij})$,

$$e_{ij} = E\left[\left(\hat{\xi}_i - \xi_i\right)\left(\hat{\xi}_j - \xi_j\right)\right] \tag{13.6}$$

は

$$e_{ij} \geq \frac{1}{N}\left(g^{-1}\right)_{ij} \tag{13.7}$$

であって，Fisher 情報行列の逆行列 $\left(g^{-1}\right)_{ij}/N$ より小さくできない．ただし，2 つの行列 A, B の大小は，$A - B$ が正定値行列であるときに

$$A > B \tag{13.8}$$

と定義する．

これに関して，さらに強力な定理が成立する．

定理 13.1　N が十分に大きいとき，最尤推定量

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{mle}} = \arg\max_{\boldsymbol{\xi}} p\left(x_1, \cdots, x_N; \boldsymbol{\xi}\right) \tag{13.9}$$

は，Crámer–Rao 限界を漸近的に等号で達成する．すなわち最尤推定量 $\hat{\boldsymbol{\xi}}_{\mathrm{mle}}$ は漸近的に不偏で，最も良い推定量の一つである．

指数型分布族に限れば，双対座標系 $\boldsymbol{\eta}$ を用いることにより上記の定理は有限の N でも等号で達成できることを前回に見た．一般の場合は等号にならず，漸近的にしか達成できないのは，分布族が幾何学的に曲がっているからである．最尤推定や推定の誤差に関する Crámer–Rao の定理は統計学の基本と言える．空間の幾何学構造がこれをもとにするのは極めて自然である．すなわち，不変なリーマン計量 g_{ij} が Fisher 情報行列で与えられる*2)．

13.2 曲指数型分布族における推論

確率モデルとして，n 次元の指数型分布族自身ではなくて，そこに埋め込まれた部分モデルを考える．モデルは m 次元のベクトルパラメータ $\boldsymbol{u}=\left(u^1,\cdots,u^m\right)$ で指定された確率分布の族

$$M=\{p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u})\} \tag{13.10}$$

とする．さらにこれは，n 次元 $(n>m)$ の指数型分布族 S に埋め込まれているとし，M の点 $\boldsymbol{u}$ は S の点 $\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{u})$ 入っているとする．このとき，確率分布は S では

$$p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u})=\exp\left\{\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{x}-\psi\left\{\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{u})\right\}\right\} \tag{13.11}$$

の形で埋め込まれる．これを (n,m) 型曲指数分布族と呼ぶ．S で双対座標（期待値パラメータ）$\boldsymbol{\eta}$ を用いれば，この埋め込みは $\boldsymbol{\eta}$ 座標では

$$\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{u})=E_{p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u})}[\boldsymbol{x}] \tag{13.12}$$

のように書ける．

M は S の m 次元の部分空間である．したがって，M の各点に残りの $n-m$ 次元を補完する $n-m$ 次元の曲面を付け加え，その座標系を $\boldsymbol{v}=\left(v^{m+1},\cdots,v^n\right)$ とする．すると，$\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ とで S の点が指定できる．これをまとめて

$$\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) \tag{13.13}$$

と書けば，新しい座標系が作れる．ここで，$\boldsymbol{v}=0$ は M の上に乗るように $\boldsymbol{v}$ 座標を選ぶ（図 13.1）．

推定とは S における観測点 $\hat{\boldsymbol{\eta}}=\bar{\boldsymbol{x}}$ を M に写像することであった．推定の方式を定めれば，点 $\boldsymbol{u}$ に写される S の点の集まりが決まる．これを $\boldsymbol{u}$ 点の推定補助多様体と呼び $A(\boldsymbol{u})$ と書いた．$\boldsymbol{v}$ 座標を $A(\boldsymbol{u})$ の内部に取ると，$\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$ 点は $A(\boldsymbol{u})$ に入っていて，$A(\boldsymbol{u})$ の内での位置が $\boldsymbol{v}$ であることがわかる（図 13.1）．この座標系を選ぶと，推論の性質を解析するのに便利である．

ここで $\boldsymbol{w}$ の添字を $\boldsymbol{w}=(w^{\alpha})$ のように書き，$\alpha=1,\cdots,m$ は $\boldsymbol{u}=(u^a)$ の部分，$\alpha=m+1,\cdots,n$ は $\boldsymbol{v}=(v^{\kappa})$ の部分を示すものとしよう．$\boldsymbol{\theta}$ から $\boldsymbol{w}$ への座標変換のヤコビ行列を

*2) Fisher 情報行列を用いて，空間の計量を定めようというアイデアは Rao 若き日の大業績である．

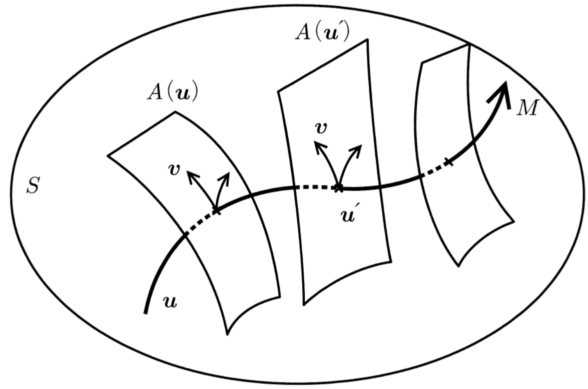


図 13.1　推定の補助多様体 $A(\boldsymbol{u})$．この図では M は 1 次元，$A(\boldsymbol{u})$ が 2 次元となっている．

$$B_\alpha^i = \frac{\partial \theta^i}{\partial w^\alpha}, \tag{13.14}$$

その逆を

$$B_i^\alpha = \frac{\partial w^\alpha}{\partial \theta^i} \tag{13.15}$$

と書く．これにより，計量テンソルを新しい座標系で書けば

$$g_{\alpha\beta} = g_{ij} B_\alpha^i g_\beta^j \tag{13.16}$$

である．このうちで $\boldsymbol{u}$ 成分のみを取り出せば，M の計量テンソル

$$g_{ab} = g_{ij} B_a^i B_b^j \tag{13.17}$$

となる．$\boldsymbol{v}$ 座標を M と直交するように取るならば

$$g_{a\kappa} = g_{ij} B_a^i B_\kappa^j = 0 \tag{13.18}$$

となる．

曲指数型分布族は特殊なモデルにすぎない，と考える読者も多いだろう．しかし，x が離散値を取るときには，確率分布をすべて集めた空間 S_n は指数型分布族であるから，離散変数のいかなる統計モデルも曲指数型分布族である．x が連続変数のときはこうはいかず，曲指数型ではない確率モデルも存在する．曲指数型になるのは，データ D に対して，観測数 N に依存しない有限次元の十分統計量が存在するとき，このときに限る．

曲指数型でないと，分布は無限次元の密度関数の空間 $F = \{p(x)\}$ に埋め込まれたことになり，これまでの有限次元の幾何学理論は使えない．しかし，これから述べる推定および検定の高次漸近理論はそれでも成立する．そこにはそれなりの秘訣がある．それを示すには，数学的には準備がいる．ファイバーバンドルである．モデル M の各点 $\boldsymbol{u}$ に，接空間 $T_{\boldsymbol{u}}$ だけでなく，接空間の曲がり方を示す法線方向の線形空間をさらに加える．こうすると，$\boldsymbol{u}$ の近傍で，有限次元の局所的な指数型分布族が定義でき，M はその中に局所的に埋め込まれ

ている．もちろん，この局所指数型分布族は $\boldsymbol{u}$ ごとに異なる．幾何学の言葉を使えば，M は指数型分布族をファイバー空間とするファイバーバンドルであり，M の埋め込み曲率などがこれを使って定義できる．この舞台で議論を展開すると，一般の統計モデルの高次漸近理論が完成し，それは曲指数型の場合と同じ表現を取る．

データ D に基づく十分統計量 $\bar{\boldsymbol{x}}$（これは S における双対座標系での最尤推定量でもある）のモーメントを求めておこう．推定誤差 $\hat{\boldsymbol{e}} = \bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{\eta}$ の形で求める．

双対アファイン座標系で測った推定誤差 $\hat{\boldsymbol{e}}$ は，中心極限定理によってガウス分布に漸近すると言ったが，どのような具合で近づくかを述べておく．これは中心極限定理を精密に評価すればよい．中心極限定理によれば，3 次のキュムラントが，$\left(N\sqrt{N}\right)^{-1}$ のオーダーで 0 に近づき，4 次のキュムラントが N^{-2} のオーダーで 0 に近づくことが分かっている．これを計算すると次のようになる．

定理 13.2 $\boldsymbol{\eta}$ 座標における推定誤差 $\hat{\boldsymbol{e}}$ のモーメントは

$$E\left[\hat{e}_i\right] = 0, \quad E\left[\hat{e}_i \hat{e}_j\right] = \frac{1}{N} g_{ij}, \tag{13.19}$$

$$E\left[\hat{e}_i \hat{e}_j \hat{e}_k\right] = \frac{1}{N\sqrt{N}} T_{ijk}, \quad E\left[\hat{e}_i \hat{e}_j \hat{e}_k \hat{e}_l\right] = \frac{1}{N^2} S_{ijkl} \tag{13.20}$$

で，高次のキュムラントが 0 に収束する．ただし，

$$T_{ijk} = \partial_i \partial_j \psi, \quad S_{ijkl} = \partial_i \partial_j \partial_k \partial_l \psi \tag{13.21}$$

は，$\boldsymbol{x}$ の 3 次および 4 次のキュムラントである．

これらを $\boldsymbol{w}$ 座標系を用いて表現しておくと都合が良い．最尤推定量を $\boldsymbol{w}$ 座標で表したものを $\hat{\boldsymbol{w}}$ とすれば，これは座標変換

$$\hat{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{w}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}\right) \tag{13.22}$$

で求まる．これは N が大きくなれば真の値 $\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{u}, 0)$ に収束するから，真の値からのずれを $\sqrt{N}$ 倍に拡大して

$$\tilde{\boldsymbol{w}} = \sqrt{N}\left(\hat{\boldsymbol{w}} - \boldsymbol{w}\right) \tag{13.23}$$

としよう．このとき，

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\eta}\left(\boldsymbol{w} + \frac{\tilde{\boldsymbol{w}}}{\sqrt{N}}\right) \tag{13.24}$$

をテイラー展開すると

$$\bar{x}_i = \eta_i(\boldsymbol{u}, 0) + \frac{1}{\sqrt{N}} B_{\alpha i} \tilde{w}^{\alpha} + \frac{1}{2N} \partial_{\alpha} B_{\beta i} \tilde{w}^{\alpha} \tilde{w}^{\beta} + \cdots \tag{13.25}$$

の形の式が得られる．展開の係数は η_i を w_{α} などで偏微分した係数

$$B_{\alpha i} = \frac{\partial \eta_i}{\partial w^{\alpha}} \tag{13.26}$$

である．(13.25) 式を注意して逆転し，$\tilde{\boldsymbol{w}}$ を

$$\tilde{w}^{\alpha} = g^{\alpha\beta} B^{i}_{\beta} \tilde{x}_i - \frac{1}{2\sqrt{N}} C_{\beta\gamma}{}^{\alpha} \tilde{w}^{\beta} \tilde{w}^{\gamma} \tag{13.27}$$

のような形で書いておく．ここで，右辺第 2 項の $\tilde{w}^{\alpha}$ にその近似値 $w^{\alpha} = g^{\alpha\beta} B^{i}_{\beta} \tilde{x}_i$ を代入すれば，右辺は $\tilde{w}^{\alpha}$ を $\tilde{x}^{i}$ で展開した形になる．本当は $\tilde{\boldsymbol{w}}$ の 3 次の項まで必要になる．

$\tilde{\boldsymbol{x}}$ の確率分布は漸近的にガウス分布であり，さらに精密に議論してその 3 次，4 次のキュムラントまで求めた．したがって，ここから $\tilde{\boldsymbol{w}}$ についての分布が求まる．$\tilde{\boldsymbol{w}}$ は漸近的にはガウス分布だから，多変数 Hermite 関数を利用して Edgeworth 展開という形で求まるが，ここでは深入りしない．これらについては文献 1, 2) に詳述してある．

とりあえず $\tilde{\boldsymbol{w}}$ の期待値と分散を求めておこう．(13.27) の期待値をとると，$E[\tilde{x}_i] = 0$ だから

$$E[\tilde{w}^{\alpha}] = -\frac{1}{2\sqrt{N}} C_{\beta\gamma}{}^{\alpha} g^{\beta\gamma} \tag{13.28}$$

で，漸近的には 0 である．しかし $\hat{w}^{\alpha}$ は $1/N$ のオーダーのバイアスを含みその $1/N$ の項は

$$C^{\alpha} = C_{\beta\gamma}{}^{\alpha} g^{\beta\gamma} = \Gamma^{(m)}_{\beta\gamma}{}^{\alpha} g^{\beta\gamma} \tag{13.29}$$

である．これは空間 S の m 接続の係数から求まる．したがって座標系に依存するのでテンソルではない．また，N 倍に拡大した $\hat{\boldsymbol{w}}$ の分散は，

$$E\left[\tilde{w}^{\alpha}\tilde{w}^{\beta}\right] = g^{\alpha\beta} + O\left(\frac{1}{N}\right) \tag{13.30}$$

で，これは $\boldsymbol{w}$ 座標系で表した Fisher 情報行列 $g^{\alpha\beta}$ に，さらに高次の項がつく．これも詳しく計算することができる．詳細は文献 1, 2) または論文[3)]に譲る．幾何学的な方法ではないが，実質的に同じものが文献 4) などでも見られる．

13.3 統計的推定の漸近理論

推定は，データ D が定める S における観測点（最尤推定量）$\hat{\boldsymbol{\eta}} = \bar{\boldsymbol{x}}$ から，M への写像であると述べた．前節では，$\hat{\boldsymbol{\eta}}$ を新しい座標系 $\boldsymbol{w}$ で表し，$\hat{\boldsymbol{w}}$ の特性を見た．$\hat{\boldsymbol{w}}$ を M に写像して推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ を求める．このため，写像の原像，すなわち一点 $\boldsymbol{u} \in M$ に写る S の点の集合を $A(\boldsymbol{u})$ と書いて，これを推定に伴う補助多様体と呼んだ（図 13.1）．漸近理論では，これは M の近傍で定義されていれば十分である．

推定に関してまず必要な性質は，N が無限に大きくなったときに推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ が真の値 $\boldsymbol{u}$ に収束することである．この性質を満たす推定量を一致推定量と言う．N が大きくなれば，$\bar{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{u}, 0)$ に収束する．だから，$\boldsymbol{u}$ に付属する補助多様体 $A(\boldsymbol{u})$ が，M の点 $(\boldsymbol{u}, 0)$ を通れば，$\hat{\boldsymbol{u}}$ は一致推定量になる．$A(\boldsymbol{u})$ は

N に依存しても良いので，依存性をはっきり書くときはこれを $A_N(\boldsymbol{u})$ とする．

性質 1. $A_N(\boldsymbol{u})$ が N を無限大にしたときに M の点 $\boldsymbol{u}$ を通るとき，このときに限って，$\hat{\boldsymbol{u}}$ は一致推定量である．

一致推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ は，その誤差の分散行列が，漸近的に Fisher 情報行列の $1/N$ 倍に近づくときに，情報を有効に使っている．これを 1 次有効推定量という．

性質 2. $A_N(\boldsymbol{u})$ が M と（漸近的に）直交するとき，このときに限り一致推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ は 1 次有効推定量である．

証明 1 次の漸近理論はやさしい．(13.27), (13.30) から，$\tilde{\boldsymbol{w}}$ が漸近的にガウス分布に従い，その分散が漸近的に Fisher 情報行列の逆行列で書けることが分かる．すなわち，$\tilde{\boldsymbol{w}} = (\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{v}})$ として

$$p\left(\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{v}}\right) = c \exp\left\{-\frac{1}{2} g_{\alpha\beta} \tilde{w}^{\alpha} \tilde{w}^{\beta}\right\}. \tag{13.31}$$

これを $\tilde{\boldsymbol{v}}$ で積分すれば，周辺分布として $\tilde{\boldsymbol{u}}$ の分布 $p\left(\tilde{\boldsymbol{u}}\right)$ が分かる．線形代数の計算によって，$\tilde{\boldsymbol{u}}$ の分布は漸近的に

$$\bar{g}_{ab} = g_{ab} - g_{a\kappa} g_{b\lambda} g^{\kappa\lambda} \tag{13.32}$$

を係数とするガウス分布

$$p\left(\tilde{u}\right) = c \exp\left\{-\frac{1}{2} \bar{g}_{ab} \tilde{u}^{a} \tilde{u}^{b}\right\} \tag{13.33}$$

になる．$(\bar{g}_{ab})$ は $(g_{\alpha\beta})$ の逆行列 $\left(g^{\alpha\beta}\right)$ の (a, b) 部分の逆行列である．$\bar{g}_{ab}$ は $g_{\alpha\beta}$ の (a, b) 部分である g_{ab} とは違い，(13.32) 式の右辺の項だけ情報を損している．すなわち，$\hat{\boldsymbol{u}}$ の分散は Fisher 情報行列 g_{ab} の逆行列の $(1/N)$ 倍ではない．正定行列の意味で $g_{ab} \leq \bar{g}_{ab}$ である．損失が最小になるのは，$g_{a\kappa} = 0$，すなわち $A_N(\boldsymbol{u})$ と M とが（漸近的にで良いが）直交するときで，このとき $\bar{g}_{ab} = g_{ab}$ で損失がない．最尤推定ではこれが成立している．

1 次の漸近理論は，幾何でいえば接空間の理論である．だから，統計モデルが何であろうと，接空間の計量とその推定補助多様体との直交性で，話が共通にできた．これは誤差評価を $1/N$ の項まで行う理論である．高次の漸近論は，誤差評価をさらに $1/N^2$ の項まで進める．それには幾何で言えば，接続と曲率が必要になる．そのため，計算が大変煩雑である．

1 次有効な推定量はたくさんある．その中でどれが良いかを議論したい．それには，推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の誤差の分散を $1/N$ のオーダーだけでなく，さらに高次の項まで評価すればよい．議論を続けると，次のオーダーは $1/N\sqrt{N}$ になり，その次が $1/N^2$ の項である．ところが通常の推定量では $1/N\sqrt{N}$ の項は 0 になる．だから，その次の $1/N^2$ の項で勝負しよう．これを最小にする推定量を 2 次有効推定量と呼ぶ．人によっては $1/N\sqrt{N}$ の項を 2 次の項とし，これが 0 になるものを 2 次有効推定量と呼び，1 次有効な推定量は自動的に 2 次有効で

あるという性質を定理として述べているものもある．すると，$1/N^2$ の項を最小にする推定量は 3 次有効となる．しかしここではわずらわしさを避け，これを 2 次有効と呼ぶ．

2 次有効性を議論するのに，ちょっとした障害があった．それは，1 次有効推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ が $1/N$ のオーダーのバイアスを持つことである．このバイアスによって，自乗誤差は誤差の分散とは微妙に違ってきて，推定量の優劣がつかないことがある．バイアスを許容して自乗誤差を減らすというトリックが使える．Bayes 推定もこれを用いる．

1 次有効推定量のバイアスは (13.29) から計算できる．そこで，バイアスを引き去った

$$\hat{\boldsymbol{u}}^* = \hat{\boldsymbol{u}} + \frac{1}{2N} C^{\alpha}(\hat{\boldsymbol{u}}) \tag{13.34}$$

を，バイアス補正推定量と呼ぶ．これでもバイアスが完全になくなったわけではないが，それは $1/N^2$ のオーダーにまで落ちている．

定理 13.3　バイアス補正済みの 1 次有効推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の誤差の分散は

$$E\left[\tilde{u}^{*a}\tilde{u}^{*b}\right] = g^{ab} + \frac{1}{2N}\left\{\left(\Gamma^2_m\right)^{ab} + 2\left(H^{e2}_M\right)^{ab} + \left(H^{m2}_A\right)^{ab}\right\} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \tag{13.35}$$

のように展開できる．

これには大変な計算が必要であるから，その計算はここでは述べない．私も大変苦労した．ただ，2 次の 3 つの項の意味を説明しておこう．まず

$$\left(\Gamma^2_m\right)^{ab} = \Gamma^{(m)^a}_{cd}\Gamma^{(m)^b}_{ef} g^{ce} g^{df} \tag{13.36}$$

は，パラメータ $\boldsymbol{u}$ の座標系に関わる m 接続の 2 乗である．これはパラメータ $\boldsymbol{u}$ のとり方に依存する．ここからも，誤差の分散行列がテンソルではないことが分かる（1 次の項は Fisher 情報行列の逆行列でテンソルであった）．

$$\left(H^{e2}_M\right)^{ab} = H^{(e)\kappa}_{ec} H^{(e)\lambda}_{fd} g^{cd} g_{\kappa\lambda} g^{ae} g^{fb} \tag{13.37}$$

は，モデル M の e 埋め込み曲率の 2 乗である．最後の項は

$$\left(H^{m2}_A\right)^{ab} = H^{(m)a}_{\kappa\lambda} H^{(m)b}_{\mu\nu} g^{\kappa\mu} g^{\lambda\nu} \tag{13.38}$$

で，これは推定補助多様体の m 埋め込み曲率の 2 乗である．補助多様体が m 平坦であるときにこれは 0 になり，誤差が小さい．

性質 3.　1 次有効推定量をバイアス補正したときに，これが 2 次有効であるためには推定補助多様体の m 埋め込み曲率が M において 0 になることである．

e 埋め込み曲率 $H^{(e)\kappa}_{ab}$ はモデル M を決めれば決まってしまう．その自乗は，e 平坦なモデル，つまりモデルが指数型分布族であるときに 0 で最小になる．指数型分布族でないときはその e 埋め込み曲率の大きさに応じて推定誤差

が（高次のオーダーではあるが）増える．一方，$\Gamma_{abc}^{(m)}$ の項はモデルのパラメータの取り方に依存して自動的に決まる．推定の仕方に関係するのは (13.38) の項のみで，推定量の性質を良くするには，これを 0 にすればよい．

最尤推定は，観測点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ から M への KL ダイバージェンスを最小にするもので，$\bar{\boldsymbol{x}}$ の M への m 射影である．したがって，$A_N(u)$ と M とは直交し，しかも推定の補助多様体の m 埋め込み曲率が 0 である．したがって次の定理が得られる．

定理 13.4　最尤推定は 1 次有効一致推定量で，さらに 2 次有効である．

これは，漸近論でいえば最尤推定が最も良いことを示す．最尤推定は Fisher が最良の推定と信じたものである．1 次の漸近理論は確かにこれが最も良いものの一つであることを証明した．これが古典漸近理論である．でも同等に良いものは他にもある．その中でどれが良いか，これを明らかにしたのが 2 次の漸近理論である．このために，Rao はバイアス補正という仕掛けをほどこし，推定量の良さの Fisher 情報量の意味で比較できるようにした[7]．すなわち $\hat{\boldsymbol{u}}$ の持つ Fisher 情報量を高次のオーダーまで評価した．1980 年代，世界の各地で 2 次の漸近理論が展開され，(13.35) と同一の結果が世界各地（日本，インド，ロシア，ドイツなど）で独自に得られた．この計算は Fisher が試みたものの完成を見ず，それを再び取り上げて幾何学の形にしたのは Efron である[6]．

最尤推定量は 2 次有効で，ここでも最良であった．そこでその先が知りたくなる．これはひょっとして，うまいバイアス補正をすれば，最尤推定量は 3 次，4 次といつも最良なのではないか．これは最尤推定神話という魅力的な話である．Rao はあるとき，3 次でも最尤推定量が最も良いことが証明できたと語り，私はそれはおかしいと反論し，後に Rao も認めた．私は自分でも密かに計算していたからであるが，うまい結果が得られなかった．狩野が，最尤推定は 3 次有効でないことを導き，これでこの問題は理論的な決着を見た[8]．

終わりの一言

統計学になぜ幾何学が必要か，これでお分かりいただけたであろうか．統計の幾何学は C.R. Rao の若き日の論文[5]に始まる．ここで Rao はリーマン計量を導入した．その後いろいろないきさつはあったが，1970 年代にロシアの Chentsov がこの理論を発展させて，接続を導入した．これは当時欧米の学界とは孤立していたソ連でおこなわれたが，ロシア語の本が一部の人々の間で日本でもヨーロッパでも読まれていた（英訳ができるのが 1982 年）．

西欧では Efron が，高次の漸近理論を幾何学と結び付ける理論を展開した．これを発展させたのが甘利，公文，長岡である．とくに双対性に基づく理論が日本で完成した．これが竹内の目にとまり，統計学の大物 Cox 卿に紹介することになった．これをいち早く世界に広めたのは，Cox 卿である．卿は，自分自身は微分幾何は素人ではあるが，この理論は統計学にとって新しい発展をもた

らす重要なものかもしれないと話し，ロンドンで国際シンポジュームを開催した．これによって一気に世界に広まったのである．私は大変幸運であった．

参考文献

1) S. Amari, *Differential-Geometrical Methods in Statistics*, Springer Lecture Notes in Statistics, **28**, 1985.
2) S. Amari and H. Nagaoka, *Methods of Information Geometry*, American Mathematical society and Oxford University Press, 2000.
3) S. Amari, Differential geometry of curved exponential families—curvature and information loss, *Annals of Statistics*, **10**, 357–385, 1982.
4) M. Akahira and K. Takeuchi, *Asymptotic Efficiency of Statistical Estimators: Concepts and Higher Order Asymptotic Efficiency*, Springer Lecture Notes in Statistics, vol.**7**, 1981.
5) C.R. Rao, Information and accuracy attainable in the estimation of statistical parameters, *Bull. of the Calcutta Mathematical Society*, **37**, 81–91, 1945.
6) B. Efron, Defining the curvature of a statistical problem (with application to second order efficiency), *Annals of Statistics*, **3**, 1189–1242, 1975.
7) C.R. Rao, Efficient estimates and optimum inference procedures in large samples, *J. Royal Statistical Society, B*, **24**, 46–72, 1962.
8) Y. Kano, Beyond third-order efficiency, *Sankhya*, **59**, 179–197, 1997.

（あまり・しゅんいち，理化学研究所脳科学総合研究センター）

科学と社会

Science & Society

第4回　国家・学問・戦争の諸相

何のために，どこまで西洋化するのか

岡本　拓司

4.1 伝統か西洋か

前回は，幕末から明治維新期の日本で，主として西洋の軍事力に圧倒されたために科学の導入の必要が了解されたことを確認した．その一方で，西洋の学問，特に科学の成り立ちが明らかになるつれ，これが「実測」「器械」「有形の理学」といった複数の文化圏に通用する基盤から成り立つ普遍性を持っていることや，そうした学問が日本を含む中華文化圏の伝統にはなかったことが理解されていく様子も見た．さらに，後から見れば，明治維新に伴って必然的に行われたかのように思われる西洋式の学問・教育の導入に対しても，日本の独立の維持を目的とするという明治維新の性格を反映して，維新直後は国学者・漢学者が強く反発し，明治5年（1872年）の学制によって西洋化の方針が明らかになった後にも，元田永孚らの明治天皇侍補を中心とする宮中派が，特に伝統的な道徳教育の重要性を訴えながら，執拗に抵抗を試みていたことも指摘した．

学問や教育に携わった当時の人々が意識していたかどうかは明らかではないが，このとき彼らは，独立した国家たるべき日本において，政治・道徳・学問等，精神の根幹に関わる領域のうちの相当な部分を，維新前の伝統とは全く様相を異にする西洋のそれに移し変えなければならないという困難な課題に直面していた．明治12年（1879年）には，この課題の困難さは，西洋化を推進する伊藤博文らと，従来の道徳観に基づく教育を支持する宮中派の，教育政策をめぐる対立として表面化した．

独立国たる日本が，必要に迫られたとはいえどの程度西洋化すべきか，その程度をどのように根拠付けるかという課題は，教育にとどまらず，維新後の日本の多くの領域で，意識的にあるいは無意識的に，何らかの形で解決されなければならなかった．国家が教育に科学を導入し，またさらに積極的に世界の（といっても実際には欧米の）科学者の作る共同体に日本人が参加して科学研究を行うといった事態が生ずる際にも，同様の問題がある種の解決を見ていたと想定することができる．後者については次回に検討することとし，今回は，幾つかの分野で，ほぼ同種の課題が，明治20年（1887年）前後，つまり帝国大学の設立（明治19年），大日本帝国憲法（明治憲法）の発布（明治22年），教育勅語の渙発（明治23年）の頃に一応の解決を見ていった状況を確認しておくこととしたい．

4.2 どのような憲法を作るか

西洋化と伝統の調和について，最も深刻に解決

が求められたのは，明治維新後の日本をどのような国家にしていくのかを明確にしていく過程においてであった．この課題は具体的にはどのような憲法を定めるかという問題に収斂し，またこの問題の困難さを充分に理解して対処したのは，大久保利通亡き後の明治新政府の主宰者であった伊藤博文であった．

明治10年代初めの日本では，西南戦争（明治10年）の終結により士族の反乱は収まったものの，翌年には大久保の暗殺があり，また自由民権運動の高まりが国会開設を求める多くの請願・建白の提出（明治13年）をもたらすに至っていた．即時の国会開設といった性急な解決は不可能であったが，それにしても必要であったのは，国家の進むべき道筋を示す大方針の確定であった．いまから振り返れば重大に思われるこの問題は，しかし，当事者たちにはあまり深刻に受けとめられてはいなかった．参議たちが意見の提出を求められ，山県有朋（1838–1922）が明治12年に，井上馨（1836–1915）が翌年に，憲法制定や議会開設の構想を提出したが，いずれも，欧米の事例として紹介されている三権分立や議会政治を，形のみ真似て作れば事足りるとする程度のものであった．明治13年（1880年）には元老院が国憲第三次草案を作成したが，やはり諸国の憲法を翻訳して条文を寄せ集めたものに過ぎなかった[1)]．

伊藤博文は，しかし，外国の制度の単純な移植が成功するとは考えていなかった．当時の日本には，君主と対峙しながら政治的な実権を獲得し，国家の危機には自ら武器を手にとって闘ってきた，ヨーロッパの国民国家の中核をなす（と想定される）市民層はなく，その存在を前提とした議会の開設は不可能である．また，明治維新によって君主となった天皇は，長きにわたって政治や軍事から遠ざかっており，実務に携わる能力ももたない．この点で専制君主や啓蒙君主が諸勢力とせめぎあってきたヨーロッパとは事情が異なるが，天皇の権威と価値が急上昇した幕末から維新に至る経緯を考えれば，憲法上，天皇の扱いを軽いものにすることはできない．福沢諭吉や自由民権論者の好む英米仏の制度を移植することは不可能であり，学ぶとすればドイツの方式であったが，それでも日本の現状はドイツとは異なっており，単純な翻訳で新たな国家の基礎が築き得るわけではない．日本についての理解は他の指導者とほぼ共通であったと思われるが，欧米の歴史や実情についての知識において抜きん出ていた伊藤は，以上のような理解をもとに，憲法制定や議会開設には慎重な準備が必要であると考えていた．

伊藤も参議として意見を提出することを求められていたが，課題の困難さを理解していたこともあって，具体的にどのような制度ならば日本の実情に即したものになるのかを，他の参議のように容易に示すことはできなかった．制度設計や文章の起案に抜群の能力を示し，ドイツの憲法にも通じていた井上毅（1844–1895）とともにおおよその方針を作ることはできたが，それより先に進むことはできなかった．英米独仏の統治や政体の概略は知られていたが，それらの中に伊藤の構想を表現するための導きの糸となるべきものを見つけることはできず，また独自の発想を展開する余裕も準備もなかった．

明治14年（1881年），伊藤に構想の具体化を迫る事態が発生した．立憲政体に関する意見を提出していなかった大隈重信（1838–1922）が，イギリス式の議院内閣制を基本とし，天皇の地位や役割が不明確な制度を提言する意見書を提出したのである．明治14年中の欽定憲法の制定や，2年後の国会開設といった性急な提案も含まれていた．伊藤や山県らの方針とは大きく異なる構想を，その機会がありながらも同僚の参議に相談することなく提出した大隈は，怒った伊藤の主導により，偶然同時期に起こった開拓使官有物払下事件の処理と並行して罷免され，内閣を追われた（「明治十四年の政変」）．一方で，憲法制定や国会開設の予定をこれ以上曖昧なままにしておくことはできず，政府は，大隈罷免の翌日には明治23年（1890年）の国会開設を天皇の名によって発表した[2)]．

政変の過程で，政府では伊藤を中心に薩摩・長州両系の政治家が結束を固めるようになり，ドイ

ツに倣った，君主の権限の強い憲法の制定を目指すという方針（「岩倉憲法意見書」）も明らかにされた．次いで現実的な構想の策定が着手されなければならなかったが，雑音の多い日本で，限られた知識を頼りにこれを行うのは不可能であった．明治15年（1882年），「憲法取調」のため，伊藤は少数の随行者とともにヨーロッパへ旅立った．

ヨーロッパで憲法取調を行うといっても，すでに独自の課題を設定していた伊藤は，一方的な学習に甘んじたわけではなかった．西洋の理想を学んだ上で，いかに現実離れしていようともそれを日本に押し付けるといった態度は，伊藤には取りようがなかった．最初に教えを乞うたのはベルリン大学のグナイスト（Rudolf von Gneist, 1816–1895）であったが，憲法はその国の歴史や文化と密接な結びつきがあると考えるこのドイツ憲法学の泰斗は，自分が深い知識を持たない日本に対して示唆を与えることに躊躇しながら，一方で憲法や議会政治は日本には時期尚早であると看做しているようであり，また，政府が議会対策に苦慮しているドイツの状況から，議会の予算審議権を認めるべきでないなどといった，日本の現状にも伊藤の理想にも適さない忠告を与えた．グナイストからは自身の望む知識を得ることができないと悟ると，伊藤は，勧める者も多いシュタイン（Lorenz von Stein, 1815–1890）を訪ねてウィーンに移動した[3)]．

すでにベルリンにおいて，伊藤は，憲法の構想を得ようとすれば，区々たる条文が問題になるのではなく，国家全体の方針を定める必要があることに気づいていた．ウィーンのシュタインは，憲法学者というよりは国家学者であり，また彼が講じた内容は，国家の形態全般にわたって，伊藤が無理なく日本の現状に適用できると感じられるものであった[4)]．個別には，憲法や議会のみで善良な行政は保証されず，優れた行政組織が必要であること，確立した君主・政府・議会の三組織が拮抗し，それぞれを統御する法が定まっている必要があること，従って，立憲制の下では君主は専制を行わず，その権限は憲法を含めた法律が定めること，政府と議会が対立した場合には最終的な判断が君主に委ねられることなどの知見を得て，伊藤は，ウィーンにおいて憲法取調が実を挙げたことを確信した．

後の伊藤の構想を見ると，しかし，ヨーロッパでの憲法取調によって出会ったもののうち，彼に最も大きな影響を与えたのは，シュタインを含む当時のドイツ語圏の学者たちの，自然法や社会契約説といった抽象的・仮想的な議論とは一線を画した，憲法を含む国家体制は，その国の歴史や文化に根拠をもつべきであるとする態度（「歴史主義」）であったと考えられる．制度・組織や法に関する個別の知識は書物を介して得ることが可能であり，そこに英米独仏の違いを感じ取ることもできよう．しかしそれらの違いが何に由来しているのか，またそれらをどのように運用すべきか，具体的にはいずれかを模範としてそれに現実をあわせるべく努力しなければならないものなのか，あるいは英米独仏が異なるように日本が独自の制度を築いてもよいのかといった点について確信を得ることは難しい．伊藤がベルリンで気づき，ウィーンで了解したのは，ドイツ語圏で得た知識におおよそ沿いながら，日本の実情に即した独自の体制を築くことが，他ならぬ西洋の最新学説によって保証されているという事実であった．つまり，西洋の学問の状況こそが，西洋の理念の不自然な移植を勧めず，日本の歴史や現状にあった体制の採用を促していた．伊藤はイギリスにも2カ月滞在して調査を行ったが，そこで出会ったスペンサー（Herbert Spencer, 1820–1903）もまた，伝統や慣習との調和の下での漸進的な社会進化を理想としていた．

明治憲法は，伊藤と，井上毅，金子堅太郎（1853–1942），伊東巳代治（1857–1934）による草案作成，および枢密院での審議などを経て，明治22年（1889年）に発布された．法律家を含む多くの人々がこれをドイツの憲法の翻訳であると看做したが[5)]，伊藤自身は他国の憲法との違いをよく理解していた．最大の違いは第一章に天皇大権が明記されている点であり，伊藤によればこれは，開闢以来，万世一

系の天皇が日本を統治してきたことの反映であった．主権は天皇にのみ帰するのであり，国家の諸機関は委任を受けて多様な業務を遂行する[6]．こうした明治憲法の構成は，歴史や伝統に起源はもつが，実際には明治維新によって当事者能力のないまま君主となった天皇を権威として仰ぎながら，行政機関たる政府が統治の実務にあたるという実態を表現したものであったと理解できる．

実際には，天皇は現実の国家運営から離れて久しく，そこにのみ不可分の主権があるとする理由を歴史に求めるとすれば，強弁にならざるを得ない．反面，征夷大将軍でさえ朝廷が任命するという一種の擬制を原動力に幕末・維新の情勢が展開した経緯を考慮して，何とか天皇主権を根拠付けようとすれば，万世一系云々の歴史と伝統を持ち出さざるを得ない．いずれにせよ，これは明治維新自体が抱えた困難であったが，明治憲法にも無傷のまま持ち込まれ，その結果，伊藤の主張するような，日本は開闢以来天皇が統治してきたという神話のような解釈が，憲法にも付随することとなった．

以上見た通り，西洋の最新学説に従いながら，大枠で立憲制の精神から外れることなく，しかし日本の歴史や文化に根ざした国家体制を築こうとした努力は，明治憲法として実を結んだといえる．この過程は日本の側が払った努力を明らかにするとともに，立憲主義のような西洋の文物や制度は，受容者・参加者に大枠の規則に従うことを要求しながら，個々の独自性は保持することを許容するものであったことを物語っている．あるいはむしろ，参加者にはそれぞれの独自性を主張することが求められたといってよいかもしれない．

4.3 生存競争のための西洋化

憲法制定は，国内情勢に突き動かされたことを契機に，どのように西洋の制度を受け入れるかを検討するという形で進んだが，同時期に，東アジアでは，対外関係を顧慮すれば西洋化を進めざるを得ないと思わせるような事態も進行していた．

幕末・維新期に西洋化の必要を感じさせたものが，主として軍事面での西洋の優位であったことは前回述べたが，明治10年代半ば以降，日本は安全保障に関して明確な方針を固めることを迫られていた．明治15年（1882年）に朝鮮で壬午軍乱が起こると，日本でも外征用の軍隊の建設が構想されるようになり，明治17年（1884年）にやはり朝鮮で起こった甲申事変を契機に，陸海軍ともに清国を仮想敵国と看做して軍備の拡充を開始した．混乱する朝鮮付近は，勢力争いを激化させていたイギリスとロシアの抗争の場となり，ベトナムをめぐって清国と衝突していたフランスは台湾に進出する気配も見せた．明治18年（1885年）には，イギリスが巨文島を占領するという事態も発生した（「巨文島事件」）．

まず軍隊の強化が必要であり，明治20年（1887年）には，当時初代内閣総理大臣であった伊藤博文は，皇室からの内帑金と全国の有志からの寄附により海防を強化し，東アジアでの勢力伸長を図る清国やヨーロッパ諸国に対抗する決意を固めた．さらに伊藤は，地方長官を鹿鳴館に召集し，万国公法の範囲内で応分の権利を得て義務を尽くし，自立のための兵備の充実を図っていくと宣言した．これは事実上，独立を確保するためには，清国や欧米諸国と武力をもって対峙することをも辞さないとする態度の表明であった[7]．

明治も半ばのこの時期には，しかし，軍事のみに頼るわけにはいかないことも理解されていた．というよりもむしろ，軍事で列強に比肩する存在となるのが容易ではないことは明らかであり，軍事によらない他国との交渉，すなわち外交の重要性が意識されていた．伊藤の言動に万国公法（国際法）への配慮が見られるのもこれを反映している．この外交の当事者からは，また別の形での西洋化の必要が主張されていた．

維新以来，外交の最重要懸案の一つは不平等条約の改正（「条約改正」）であったが，これは日本が維持すべき独立の意味にも関わっていた．周辺諸国の認識も同様であり，後年，孫文が神戸で行った「大アジア主義」と題する演説（大正13年）で

は，条約改正前の日本は独立国とは看做されていない．多くの西洋諸国を相手に試行錯誤を繰り返した条約改正の過程は，西洋の文化圏に参加することが何を意味するかを日本の指導層に知らしめるための試練の場となった．明治 20 年（1887 年），伊藤の下で外務大臣を務めながら，条約改正交渉に失敗した井上馨は，内閣に提出した有名な意見書において，自身の失敗の経験をもとに，日本の外交上の立場を強くするためには，日本とその人民が，「欧州邦国」や「欧州人民」のようにならなければならない，つまり「欧州的一新帝国を東洋の表に造出」しなければならないと述べた．これは，国民が「勇敢活発の人民」となり，「自治の制」と「活発の行動」を示すことで，国民と政府の隆盛がもたらされるからであるが，そのためには国民は西洋諸国と不断に接触し，「泰西活発の知識」を身につけなければならないという．外交の責任者は，日本が独立を保つための，文化や精神における西洋化を訴えていた[8)]．

日本が進むべき道を示す必要のあった伊藤の主張は，さらに明快であった．憲法発布直後，国家の向うべき道を親王や貴族に向って述べた講演（明治 22 年）の中で，伊藤は，万世一系の天皇の統治下にある日本は世界に比類のない国であると述べながら，しかしこれをもって他国を野蛮であるとするのではなく，自国の誇りとして捉えるのがよいという．その上で，他国との競争を行って独立や国威を保つ必要があるが，これには学問を通じて，人民の「学力知識」を進歩させる必要があると論ずる[9)]．伊藤の下では，文部大臣の森有礼（1847–1889）が，小学校から帝国大学に至るまでの教育制度を確立していた（明治 19 年）．大筋で西洋化の方針に従った森の政策の背景には，他国との競争の中で独立を保つためにはこうした改革が必要不可欠であるとの，内閣を挙げての了解があったものと思われる．ここで意図されていたのは，単に知識を吸収して終わる，西洋文化圏の中で優等生たろうとするための学習ではなく，学んで力をつけた後の競争であった．必要とあらば実力に訴えようとする西洋諸国の姿が東アジアでも露わになった状況や，行儀よく臨むばかりでは進展しない条約改正交渉の経験が反映された決意であったように思われる．

4.4 森有礼の学問論

初代文部大臣の森は，おそらく伊藤より明確に外国との競争を意識しながら，強い国家主義に基づく教育政策を実施していた．また森は，明六社を創設して啓蒙活動を行うなど，西洋流の教養を身につけた知識人としての一面も持っており，文政の責任者として初めて教育と学問を区別した上で，国家のための学問のあるべき姿についても一定の見解を示していた．伝統と西洋化の調和という問題に対して，内政・外交において国家の進むべき道を示すことで伊藤が回答に一つの方向を与えたとすれば，森は伊藤と方向を共有しながら，文教政策における具体的な方針と解決案を明らかにしたといえる．森は盛んに講演や執筆を行っており，それらを見ることで，明治 20 年前後，教育と学問において，伝統の保持と西洋化の間の均衡がどのように保たれようとしていたかを理解することができる．

伊藤に教育行政を委ねられる以前の森は外交官であった．その経験から，森は，日本は危機的な状況にあると考えており，もし現在のまま進歩することなく停滞すれば，「日本国を挙て外国に併呑せらるるか，独立国の名ありて実なき保護国になるか」，二つに一つであると看做していた．明治維新以前の鎖国の時代ならば，日本の独立が危ぶまれるような状況は生じなかったが，開国して他国，具体的には西洋諸国と交際するようになり，「万国競争の今日」に至ったのである．維新以降日本も長足の進歩を遂げたが，森の見るところ，その実力は独立を安泰なものにするには至っていなかった[10)]．

西洋諸国の築いた文明圏は競争に満ちており，進んで挑戦しなければ滅亡・衰退が待っている．この競争とは，実力を行使する戦争のみならず，「外国に関したる工商業上の戦争，又は智識上の戦争」

など，あらゆる場面で展開されるものであるというのが森の理解であり，智識上の戦争にも，「有形上或は無形上の智識の競争」があるという．ではこのような世界で日本が生き残っていくために，教育は何をすべきか．まず重要なのは，現在の地位に甘んずることなく，「我日本国が是迄三等の地にあれば二等に進め，二等にあらば一等の地位に進め遂には万国の冠たらん」と望むような気概を国民の中に涵養することであった．森から見れば，当時の日本の国民は，愛国心をもって団結している「欧米の人民」に比べて，国家意識においていまだ欠けるところがあった．

具体的な教育の内容についてはどうか．森が国家の指導層となるべき者の育成機関として想定していた高等中学校（明治27年より高等学校）に即して見ると，「外国の語を学ぶ者は前途国勢を左右し得る程に至るや必せり」という理解に基づいてか，理科系であっても週の授業時間の三分の二ほどが欧語（英独仏から2つ．医科などではラテン語も含む）の教育に充てられていた．歴史では日本や中国のそれも教えられたが，「希臘羅馬独仏英米の歴史」も漏らさず教授され，倫理も西洋式であった[11]．日本史上の著名な場面を描いた歴史画の採用など，日本的な要素も取り入れられてはいたが，いわゆる「旧制高校教養主義」という言葉から思い浮かぶ通り，理科でも文科でも，教育の主眼は，西洋の指導層が身につける内容を一通り習得させることにあった．森は教育の目的は国家の独立を維持すべき人材の養成にあると考えていたが，教科内容に日本の歴史や文化を強く反映させることはなかった．その余裕はなかったといってもよいかもしれない．森にとっての最重要課題は，主たる競争相手と想定される西洋諸国と互角に戦うための人材の育成であり，彼らが身につけるべき知識や教養として想定されたのは，おおよそ西洋流のものであった．

一方で，森は，自身が学問の府と位置づける帝国大学には，国家のための「講究」を行うことを求めた．森が憲法発布の直前に帝国大学の教官・職員・学生に向けて行った講演（明治22年2月7日）の草稿には，英仏独の法理法政の研究も大切であるが，日本古来の法律や国体を実用に適するものとする研究も緊要であること，経済学でも理財の原則の研究にとどまらず国家に益するよう努めるべきであること，文学・史学でも国語国文や国史を疎かにせず，古今東西の文学・歴史を講ずる際にも国家を主眼とすべきこと，理学・工学・医学においても国家への益を考えて研究の力点を変化させるべきであり，外国特殊の事物の研究を日本で緊急に必要とされる研究より前に置くべきではないことなどの要請が記されている．講演後の新聞記事には，医学理学まで「国粋保存主義」か，優等なる西洋仕込みの科学を専攻するのは国家を忘れているというのか，と揶揄するものもあったが[12]，森の主張は，研究の目的を国家の利益に置き，研究の対象をその目的に従って選ぶべきであるというもので，具体的な理論や方法に西洋流を採用することは，断るまでもない大前提であったと思われる．

森はまた，学問には純正学（「ピユーアサイエンス」）と応用学（「アツプライドサイエンス」）があり，共に国家にとって必須であると了解していた．特に，事物の真理を攻究する前者は，大博士と称される人々が専修すべきであるとした．ただし，日本の置かれた現況では，応用面での研究や人材育成を先にし，「致知」は後にすべきであると判断していた[13]．

西洋式の学問を採用しながら目的や対象を日本という国家の利益に沿ったものにする．このような態度を森は「和魂和才」とも記していた．方法や規則として西洋の学問を取り入れ，それに習熟することで，西洋中心の世界における競争に勝って独立を保つ．戦前期全般にわたって続く教育体制を構築した人物は，このような理念に基づいて西洋化と伝統の間の均衡を得ようとしていた．

4.5 森の辿った道

国粋的ともいわれる教育観で知られる森は，若い頃はまた極端な西洋偏重であったことでも有名

である．開化主義から国家主義への振れ幅は，常に政府の中心にいた伊藤よりも大きかったといえるかもしれない．以下では，森の辿った道を瞥見し，明治期前半の日本が西洋と対峙する姿勢をどのように固めていったかを確認しよう．

森は，薩摩藩がイギリスに送った留学生の一人で，慶應元年（1865年）から2年ほどはロンドンを拠点として学び，次いでアメリカに渡って，維新後の新政府に出仕するために帰国する明治元年（1868年）までをそこで過ごした[14]．アメリカに移ったのは，ハリス（Thomas Lake Harris, 1823–1906）の率いる教団で共同生活を送るためであった．ハリスの教えは，やや年長の黒田清隆（1840–1900）であれば淫祠邪教と看做すようなものであったが，森がこれに惹かれたのは，他国への野心を隠さない西洋諸国がいずれもキリスト教国であり，ハリスの思想が一見キリスト教を超越するかのような言辞に満ちていたためであろう．ハリスの思想を採用することで西洋に打ち勝つ日本を築こうというのが，この頃の森の発想であり，西洋諸国との競争の中で日本がどのように独立を保つかという課題は，すでに十代終わりの頃から森の心を捉えていたといえる．

新政府に出仕するようになると，英米の事情に通じた森は重用され，実名の利用や郡県制採用など，革新的な政策の提言を始めた（明治2年）．顕著であったのは廃刀の主張であったが，明治9年（1876年）の廃刀令より7年早いこの提案は，森への多くの非難を招いた末に不採用となった．この時期の森は，日本の実情をあまり顧みることなく，まずは西洋の制度や習慣を日本に定着させることを考えたようである．

同じ傾向は，明治4年（1871年）に外交官として再度アメリカに滞在した時期にも続いた．当時アメリカに留学していた金子堅太郎によれば，森は留学生に対し，人種改良のためアメリカ人女性を娶って帰れと告げたという[15]．再渡米当初はハリスへの崇拝も続いていたようであるが，この頃の森の特異な主張として最もよく知られているのは英語採用論であろう．日本語や中国語（森は日本語の書き言葉は中国語であると考えていた）では文明化に適さないので，正書法の徹底や動詞の不規則変化の修正を行った上で，英語を日本の公用語としようというのであった．物理学者のヘンリー（Joseph Henry, 1797–1878）のように賛意を示す者もいたが，日本人との交渉のあった鉱山技師のブレーク（William Phipps Blake, 1826–1910）は日本人が日本語を捨てるとは思われないとの感想を示し，日本では馬場辰猪（1850–1888）が英語・日本語の比較の上に立って反論を展開した[16]．

森は，当初，人種・宗教・言語・慣習等，あらゆる面で西洋を模倣することを構想していたのである．これ以外に日本が生き延びる道はないと考えてもいた．しかし，誰よりもまず，手本としようとしていた西洋人が，森の企図を否定した．森が英語採用を相談した言語学者のホイットニー（William Dwight Whitney, 1827–1894）は，変形英語の採用を危ぶみ，また国民全体に及ぶ教育は母語で行われる必要があると指摘して，教養層に英語を学ばせる程度にとどめるのがよいなどの穏当な提案を行った[17]．宗教についても，森が最終的に採用したのは，特定の教義ではなく，プロテスタントの正統的な宗教家のベーコン（Leonard Woolsey Bacon, 1830–1907）の主張に沿った信教自由論であった[18]．

アメリカに次ぐ赴任先であったイギリスでは，森は，西洋式の外交に習熟して穏当に要求するのみでは一向に進展しない条約改正交渉に携わる一方で，伝統や慣習を重視するスペンサーとの親交を深めた．また，明治15年（1882）9月には，憲法取調でヨーロッパを訪れた伊藤博文とパリで話し合い，外交から教育行政への転身が準備されたようである．明治17年，帰国の途につく頃には，森は，西洋の文明に倣いながら，しかし万世一系の天皇家や個々人の愛国心，友愛の情などの長所も生かしつつ，弱肉強食の世界で勝ち抜く術を，西洋と戦うために西洋から学び取ろうとする国家の代弁者となっていた[19]．

以上の森の経験において最も印象的であるのは，西洋に学ぼうとする態度が，単なる模倣から，競

争を目的とする習得へと変わった点であろう．伊藤も同様の経験を持つが，森のほうが変化が鮮明である．こうした覚醒の要因は，憲法制定や条約改正の必要や，国際情勢の緊迫化など様々であったが，いずれにせよ，明治維新よりほぼ20年を経た段階で，多様な局面において，西洋の取り入れ方，あるいは西洋への参加の仕方について，同種の了解への到達が実現していたことは注目に値する．

今回は，教育や学問を含む多様な局面で，西洋の文物の取り入れ方が，単なる模倣から，競争を意識した学習へと変化し，同時に自国の伝統や文化を尊重する姿勢も固まっていった経緯を明らかにした．同時期，後に日本の科学を担うことになる若者たちは，主として帝国大学を拠点に研鑽を積んでいた．彼らの，日本と西洋の関わりについての理解は，一体どのようなものだったのであろうか．次回はこの問題を取り上げる．

参考文献

1) 伊藤之雄『伊藤博文　近代日本を創った男』（講談社，2009年）．
2) 瀧井一博『伊藤博文　知の政治家』（中公新書 2051，2010年）．
3) 瀧井一博『文明史のなかの明治憲法』（講談社，2003年）．
4) 瀧井一博『ドイツ国家学と明治国制』（ミネルヴァ書房，1999年）．
5) たとえば，平沼騏一郎回顧録編纂委員会編・発行『平沼騏一郎回顧録』（1955年）．
6) 瀧井，前掲[2]，『伊藤博文』．
7) 春畝公追頌会編『伊藤博文伝』中巻（1940年）．
8) 犬塚孝明『明治外交官物語　鹿鳴館の時代』（吉川弘文館，2009年）．
9) 瀧井，前掲[2]，『伊藤博文』．
10) 大久保利謙監修，上沼八郎・犬塚孝明編，『新修　森有礼全集』第二巻（文泉堂書店，1998年）．
11) 第一高等学校『第一高等学校六十年史』（第一高等学校，1939年）．
12) 「東京朝日新聞」，明治22年2月10日，「社説」．
13) 森有礼「学政要領」（年代不詳），前掲[10]，『新修　森有礼全集』第二巻，163–168ページ．
14) 犬塚孝明『森有礼』（吉川弘文館，1986年）．
15) 金子堅太郎「明治五年より同十一年まで米国留学懐旧録（一）」，『科学知識』20巻1号（1940年），102–109ページ．
16) ただし，片山潜によると馬場は英語がうまくなく，英語採用を懼れたのかもしれない（片山潜『歩いてきた道』（日本図書センター，2000年））．
17) 大久保利謙監修，上沼八郎・犬塚孝明編，『新修　森有礼全集』第五巻（文泉堂書店，1999年）．
18) 久野明子『鹿鳴館の貴婦人　大山捨松』（中央公論社，1988年）．
19) 森有礼「英京退去に際し会見筆記」，大久保利謙監修，上沼八郎・犬塚孝明編，『新修　森有礼全集』第一巻（文泉堂書店，1997年），427–453ページ．

（おかもと・たくじ，東京大学大学院総合文化研究科）

特　集（2012 年 5 月号予告）

解析学と物理学

響き合う数学的方法と物理的思考

数学 vs. 物理学，あるいは数学と物理の共鳴	伊東　恵一
関数方程式のダイナミクスとスペクトル理論	千葉　逸人
古典場とフーリエ解析	磯崎　洋
量子力学と関数解析	廣島　文生
解析学で人工原子と光の物理に挑む！	廣川　真男
素粒子論と解析学	伊東　恵一
統計力学と確率論	原　隆
電磁気学と代数解析	高崎　金久
熱力学極限と漸近解析	中津　了勇
［コラム］	竹崎　正道
［コラム］	河東　泰之

本体 952 円

特　集（2012 年 3 月号）

量子を操る

拡がりゆく量子の不思議な姿

拡がりゆく量子の不思議な姿	筒井　泉
弱測定と幾何学的位相	北野　正雄
マクロ状態と量子測定	湯浅　一哉
量子フィードバック制御の数理	山本　直樹
悪魔が操る情報の物理　情報熱力学への扉	丸山　耕司
真空に隠れる情報と量子エネルギーテレポーテーション　量子情報物理学における存在と無	堀田　昌寛
中性子による量子干渉	長谷川祐司
分子と量子力学　量子もつれのダイナミクス	河内　宣之
非局所ゲームと量子疑似テレパシー	F. Buscemi　訳：市川翼
［コラム］新時代の量子力学教育	上田　正仁
《数学的な感覚の探求》　第 3 回	岡部　恒治
《人物で学ぶ物理》　第 7 回	宮沢　弘成
《人物で学ぶ数学》　第 9 回	辻　元

本体 952 円

編集後記

今回の特集はいかがでしたでしょうか．特集中では様々な数学が登場し，それらが“量子力学”という大きな建造物に立ち向かっていく姿が見られるのではないかと思います．量子力学に限らず，物理学の様々な分野に対し，様々な数学が挑んでいく姿は相互作用による互いの学問の発展と言ってもいいかもしれません．

今後もこのような物理と数学の展開が見逃せません．　(R)

*　*

今回の特集では量子力学において数学がいかに利用されているのかということだけでなく，量子力学と数学がお互いに影響しあって発展してきたという背景も見ることができました．

物理や数学の関係だけにとどまらず，学問は相互に様々な影響を受けながら発展するものなのかもしれません．なにかを勉強するときは，注意深く広い視野を持たなくてはと感じました．　(T)

数　理　科　学　4月号

2012 年 4 月 1 日発行

数 理 科 学 編 集 部　　発行人 木 下 敏 孝
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所 ©　株式会社 **サ イ エ ン ス 社**　TEL. (03) 5474–8500（代表）
〒 151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600（広告部）

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁